

79/5  
C. v Charnowski.

Frankfurt 9/11. 1975.



Untersuchungen zum Ausbau des  
Hartree-Fock Verfahrens

Inaugural-Dissertation  
zur Erlangung des Doktorgrades  
der Naturwissenschaften

vorgelegt beim Fachbereich Physik  
der Johann Wolfgang Goethe-Universität  
zu Frankfurt am Main

von  
Cornelia von Charzewski  
aus Berlin

Frankfurt 1975



## Inhaltsverzeichnis

### I Einführung

### II Mathematisches Formalismus und physikalische Zusammenhänge

#### II.1 Grundgleichungen und Symmetrien

#### II.2 Randbedingungen

### III Aufbau des Formalismus

#### III.1 Projektion auf einen Hilbertraum

#### III.2 Vollständigkeitssatz des Fachbereichs Physik

#### der Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main

#### IV.1 Einleitung zur Darstellung eines 1D-Systems

#### IV.2 "Optimaler" 1D

#### IV.2a $A_{1/2}$ - Wechselwirkung

#### IV.2b $A_{1/2}$ - Wechselwirkung

#### IV.2c $A_{1/2}$ und $A_{1/2}$ - Wechselwirkung

#### IV.3 Darstellung der $A(1/2)$ - Werte

#### IV.4 Organismus und Modell

### V Zusammenfassung und Schluss

#### Literaturverzeichnis

#### Tabellen

#### Figuren

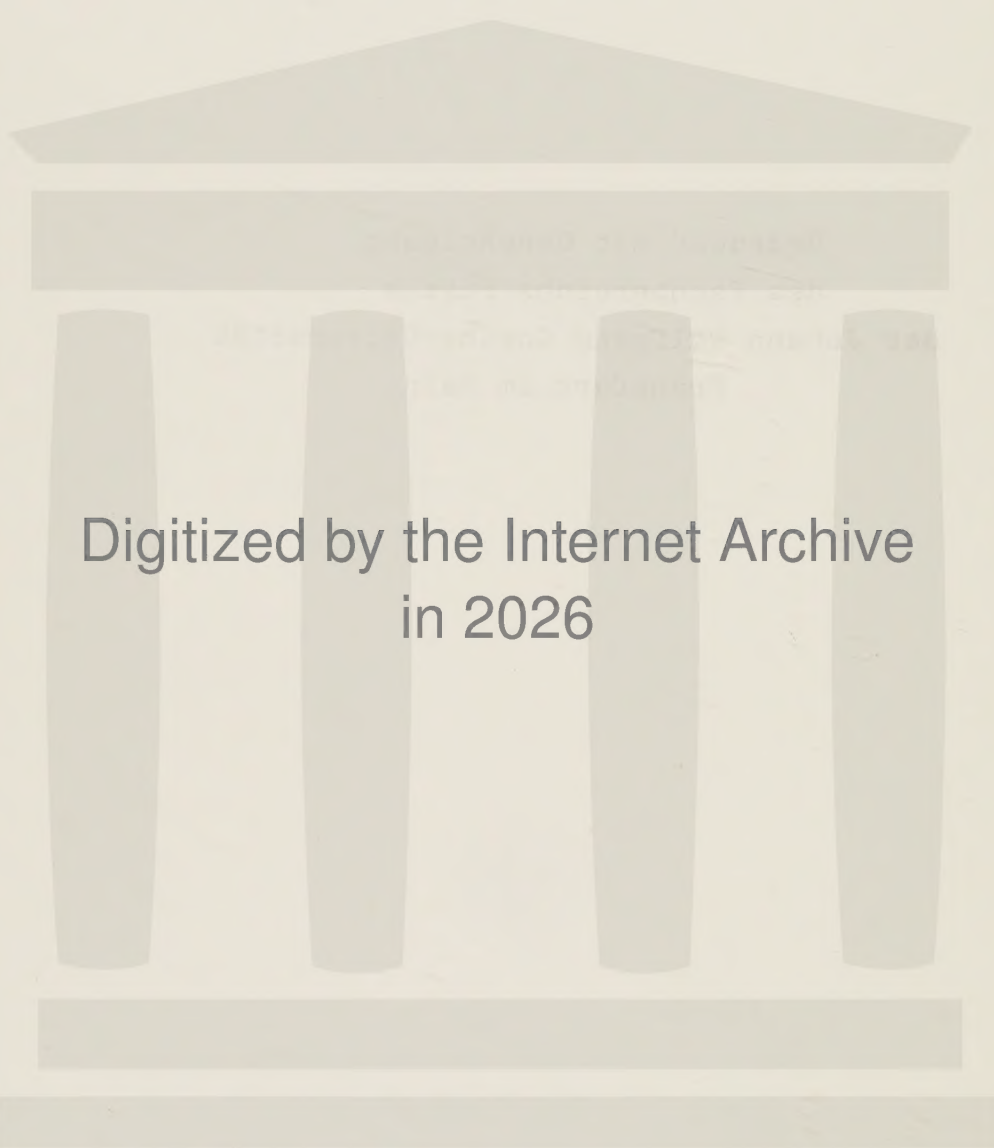
#### Appendix

Dekan: Prof. Dr. W. Pohlitz

Erster Berichterstatter: Prof. Dr. R.M. Dreizler

Zweiter Berichterstatter: Prof. Dr. W. Scheid

Tag der mündlichen Prüfung: 20. März 1975



Digitized by the Internet Archive  
in 2026

[https://archive.org/details/IA41550826\\_0048](https://archive.org/details/IA41550826_0048)

# Inhaltsverzeichnis

|                                                        |    |
|--------------------------------------------------------|----|
| I Einführung                                           | 1  |
| II Hartree-Fock Formalismus und mögliche Erweiterungen | 8  |
| II.1 Grundgleichungen und Symmetrien                   | 8  |
| II.2 Nebenbedingungen                                  | 13 |
| III Ausbau des Formalismus                             | 17 |
| III.1 Projektion auf guten Gesamtdrehimpuls            | 17 |
| III.2 Weitere Variationsprinzipien                     | 24 |
| IV Ergebnisse und Diskussion                           | 30 |
| IV.1 Praktische Durchführung einer HF-Rechnung         | 30 |
| IV.2 "Optimales" HF                                    | 33 |
| IV.2a $A_J J^2$ - Nebenbedingung                       | 34 |
| IV.2b $A_Q Q_{20}$ - Nebenbedingung                    | 37 |
| IV.2c $A_J J^2$ und $A_Q Q_{20}$ - Nebenbedingung      | 39 |
| IV.2d Berechnung der B(E2) - Werte                     | 40 |
| IV.2e Ergebnisse und Modell                            | 44 |
| V Zusammenfassung und Ausblick                         | 47 |
| Literaturverzeichnis                                   | 49 |
| Tabellen                                               | 52 |
| Figuren                                                | 59 |
| Appendix                                               |    |



## I Einführung

Die Hartree - Fock Methode entstammt der Atomphysik <sup>1)</sup>. Sie beinhaltet die Bestimmung des Grundzustandes des Atoms durch die Variation der Grundzustandsenergie, die durch einen Determinantenansatz dargestellt wird. Auf diese Weise wird das Vielteilchenproblem mit Coulombwechselwirkung, das in der Atomhülle zweifellos vorliegt, auf ein effektives Einteilchenproblem mit einem allerdings nichtlokalen Potential zurückgeführt. Die Nichtlokalität ist eine Konsequenz des Pauliprinzip. Der Determinantenansatz kann in der Atomphysik dadurch begründet werden, daß die Coulombwechselwirkung zwischen den Elektronen schwächer ist, als die Wechselwirkung mit der zentralen Ladungsverteilung des Kerns.

Die Anwendung dieses Verfahrens in der Kernphysik <sup>2)</sup> erscheint auf den ersten Blick problematisch. Neben der kinetischen Energie haben wir nur Zweiteilchenwechselwirkungen. Die Verwendung dieses Verfahrens kann nur über das Experiment begründet werden, das eine markante Schalenstruktur, d.h. ein effektives Einteilchenproblem, auch im Bereich der Kernphysik andeutet.

Die direkte Verwertung einer realistischen Nukleon-Nukleon Kraft, die an die Zwei-Nukleon Streudaten angepaßt werden, scheitert an dem Auftreten eines hard core oder zumindest einer sehr starken Abstoßung bei kleinen Nukleonenabständen. Einer solchen Wechselwirkung ist der Determinantenansatz nicht gewachsen. Als Auswege aus dieser Situation bieten sich die folgenden Möglichkeiten an.

- (1) Ein Ansatz mit einer kurzreichweitig korrelierten Wellenfunktion vom Jastrow Typ <sup>3)</sup>. Das Variationsprinzip mit einer Jastrow cluster-Entwicklung führt auch heute noch zu fast unüberwindbaren technischen Schwierigkeiten.
  - (2) Die Brueckner-Hartree-Fock Methode <sup>4)</sup>, in der die Effekte der kurzreichweitigen Korrelationen in Störungstheorie in jeder Ordnung summiert und mit einem Variationsprinzip gekoppelt werden.
  - (3) Die Benutzung einer geglätteten Wechselwirkung. Dazu kann man entweder versuchen, über die Brueckner Methode <sup>5)</sup> einen Zusammenhang mit der realistischen Wechselwirkung herzustellen, oder phänomenologische Ansätze <sup>6)</sup> zu benutzen. Letztere werden dann an die zu beschreibenden Kerne (global oder lokal) angepaßt. Die Frage nach einer realistischen geglätteten Zweinukleonenwechselwirkung vom G-Matrix Typ, ist trotz jahrelanger intensiver Arbeit auch heute noch offen <sup>7)</sup>.
  - (4) Auf der Ebene der phänomenologischen Ansätze kann man auch mit einem sphärischen Einteilchenpotential (dem Schalenmodell) und einer Restwechselwirkung arbeiten. Dieser Ansatz entstammt den Arbeiten über die Anwendung des Schalenmodells. Er konnte mit recht gutem Erfolg benutzt werden <sup>2,6)</sup>.
- Da sowohl die geglättete Wechselwirkung vom G-Matrix Typ als auch die phänomenologischen (Rest-) Wechselwirkungen noch kurzreichweitige Korrelationen vom Paarungstyp aufweisen, wäre ein HFB - Ansatz etwas besser gerechtfertigt als der HF - Ansatz in Form einer Slaterdeterminante. Dennoch hat sich gezeigt, daß

der einfache Determinantenansatz, zumindest für leichte Kerne, zu durchaus vernünftigen Resultaten führen kann.

Unabhängig von der benutzten Hamiltonfunktion liefert das Hartree-Fock Verfahren im allgemeinen noch nicht den Grundzustand. Die gefundene Lösung setzt sich aus einer Überlagerung von Zuständen mit gutem Drehimpuls zusammen. Durch Projektion auf guten Gesamtdrehimpuls lassen sich die Drehimpulskomponenten trennen und man erhält, im Falle von gg-Kernen, eine Darstellung der gesamten Grundzustandsbande. Den HF - Grundzustand bezeichnet man, in Anlehnung an die Vorstellungen des Kollektivmodells, als den intrinsischen Grundzustand. Diese Methode ist in der Literatur unter dem Namen Variation vor der Projektion (oder VBP = variation before projection) zu finden.

Eine bessere Beschreibung des Grundzustands und der anderen Mitglieder der Grundzustandsbande erhält man mit dem VAP - Verfahren (variation after projection) <sup>8)</sup>. Dazu führt man zunächst die Projektion mit einem Determinantenansatz durch und variiert dann die projizierten Zustände. Dieses Verfahren ist jedoch nur für eine sehr begrenzte Anzahl von Teilchen durchführbar. Sobald die Teilchenzahl anwächst, treten bei der praktischen Durchführung erhebliche technische Schwierigkeiten auf. Diese Tatsache hängt damit zusammen, daß der Projektionsoperator ein Vielteilchenoperator ist.

Es stellt sich die Frage nach Varianten der VAP - Methode. Eine Möglichkeit, die im Prinzip sogar über das direkte Variationsverfahren hinausgeht, ist die Generatorkoordinatenmethode <sup>9)</sup>. Hier konstruiert man einen Determinantenansatz  $\Psi(x_1, \dots, x_A, \alpha)$

aus Einteilchenwellenfunktionen  $\Phi(x, \alpha)$ . Die Größen  $\alpha$  stellen die Generatorkoordinaten dar. Als Beispiel läßt sich die Erzeugung einer Schar von Lösungsansätzen über den Nilsson - Hamiltonian anführen. Die Generatorkoordinate ist dann der Deformationsparameter  $\beta$ . Die Gesamtwellenfunktion  $\Psi(x_1, \dots, x_A)$  läßt sich als Integral über die Determinantenansätze darstellen, indem man sie mit einer Amplitudenfunktion  $f(\alpha)$  wichtet und über die Generatorkoordinaten integriert. Man hat dann die Wahl, die Amplitudenfunktion entweder durch das Variationsprinzip

$$\delta \frac{\langle \Psi | H P^J | \Psi \rangle}{\langle \Psi | P^J | \Psi \rangle} = 0$$

oder wenn man auch die Eulerwinkel als Generatorkoordinaten zuläßt durch das Variationsprinzip

$$\delta \frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = 0$$

zu bestimmen. Beide Variationsprinzipien liefern Integralgleichungen für die Bestimmung der Gewichtsfunktion  $f(\alpha)$ .

Die Zustände  $\Psi(x)$  bilden einen Unterraum  $\mathfrak{H}_\phi$  des vollständigen Hilbertraums  $\mathfrak{H}$ . Die Lösung der Variationsgleichung entspricht der Diagonalisierung des Hamiltonians  $H$  im Unterraum  $\mathfrak{H}_\phi$ . Exakte Lösungen erhält man mit dieser Methode nur, wenn sämtliche Zustände durch die Gleichung erzeugt werden, was gleichbedeutend mit  $\mathfrak{H}_\phi = \mathfrak{H}$  ist. Andernfalls erhält man Näherungslösungen zu den exakten Eigenfunktionen und Eigenwerten, deren Güte davon abhängt, in welchem Maß die Eigenwerte von  $H$  durch die Zustände in  $\mathfrak{H}_\phi$  beschrieben werden können.

Die Ergebnisse dieser Methode sollten recht vielverspre-

chend sein. Sie scheitert jedoch in der praktischen Durchführung an der Lösung der Integralgleichungen, die oftmals erhebliche Schwierigkeiten mit sich bringen.

In der vorliegenden Arbeit wird die Frage untersucht, inwieweit man das VBP - Verfahren modifizieren kann, so daß man eine dem VAP - Verfahren vergleichbare Antwort erhält, ohne jedoch denselben Aufwand zu betreiben. Wir beginnen mit einem HF - Ansatz, lösen aber ein Variationsproblem mit geeignet zu wählenden Nebenbedingungen. Durch Variation des Lagrangeparameters erhält man eine Lösungsschar  $\Psi(x_1, \dots, x_A, \lambda)$  im Sinne der Generatorkoordinatenmethode. An dieser Stelle bietet sich die Möglichkeit an, die nicht ganz unproblematische Variation mit Nebenbedingungen etwas kritischer zu untersuchen. Wir benutzen die Lösungsscharen jedoch nicht zur weiteren Verarbeitung durch die Generatorkoordinatenmethode, sondern führen andere Auswahlkriterien ein.

(1) Minimum der projizierten Energie.

(2) Minimum der projizierten Varianz.

Das erste Kriterium ist in der Anwendung einfacher und hat auch schon in der Praxis Anwendung gefunden. Ein Vergleich mit Ergebnissen der VAP - Methode steht jedoch noch aus.

Es sind auch Fälle aufgetreten, in denen die Energiekurve (als Funktion der Lagrangeparameter) äußerst flach verläuft und die Bestimmung des Minimums auf Schwierigkeiten stößt. In den hier untersuchten Fällen zeigen die entsprechenden Kurven für die Varianz immer ausgeprägte Minima.

Die Betrachtung der Varianz bietet auch die Möglichkeit, die Güte der Annäherung an die exakte Lösung abzuschätzen. Die

exakte Lösung entspricht der Varianz Null, ist aber für einen Determinantenansatz wohl nicht zu erreichen.

Ein weiteres Verfahren für die Konsistenz (und somit Güte) der Lösung ist die näherungsweise Übereinstimmung zwischen den Minima der projizierten Energien (soweit vorhanden) und der projizierten Varianz. Für die HF - Energie und die nichtprojizierte Varianz findet man im allgemeinen eine größere Abweichung, während für die entsprechenden projizierten Fälle die berechneten Wellenfunktionen fast übereinstimmen.

Man würde erwarten, daß solche Rechnungen Ergebnisse liefern, die wegen des erweiterten Variationsansatzes besser sind als VBP, auf der anderen Seite aber durch VAP begrenzt werden. Um diese Behauptung zu überprüfen, wurde der Kern  $\text{Ne}^{20}$  als Anwendungsbeispiel ausgewählt, da dort schon VAP - Rechnungen durchgeführt wurden, die wir zum Vergleich heranziehen können.

In Kapitel II geben wir eine Einführung in den HF - Formalismus. Wir sprechen kurz über die Symmetrien des Hamiltonians und geben an, welche Nebenbedingungen wir gewählt haben und wie sich diese physikalisch interpretieren lassen. Kapitel III beschäftigt sich zunächst mit der Projektion auf guten Drehimpuls. Anschließend wird das Variationsprinzip zum mittleren Schwankungsquadrat erläutert und ein Vergleich mit dem in letzter Zeit häufig zitierten Lanczos - Algorithmus angestellt. Die Ergebnisse, ihre Interpretation, sowie Vergleiche mit vorliegenden Arbeiten ähnlicher Art und mit VAP - Rechnungen diskutieren wir in Kapitel IV. Kapitel V faßt die Resultate nochmals zusammen und weist auf zukünftige Anwendungsbereiche des entwickelten Variationsverfahrens hin.

Die numerischen Rechnungen wurden auf der Univac 1108-Anlage der Universität Frankfurt durchgeführt.

## II Hartree-Fock Formalismus und mögliche Erweiterungen

### II.1 Grundgleichungen und Symmetrien

Zu Beginn dieses Kapitels soll ein kurzer Überblick über das ursprüngliche Variationsverfahren, seine Bedeutung und seine Grenzen gegeben werden.

Im Folgenden beziehen wir uns auf einen Artikel von G. Ripka <sup>6)</sup>, der die Methode ausführlich beschreibt. Das Ziel der HF - Methode ist die Bestimmung des Grundzustands  $|\Phi\rangle$  eines Vielteilchensystems durch die Forderung, daß die Variation der Grundzustandsenergie stationär bezüglich der Variation des Zustands ist

$$\langle \delta\Phi | H | \Phi \rangle = 0 \quad (2.1)$$

Die HF - Methode zeichnet sich gegenüber anderen Variationsverfahren durch ihren einfachen Ansatz für die Grundzustandswellenfunktion in Form einer Slaterdeterminante

$$\Phi(x_1, \dots, x_A) = \frac{1}{\sqrt{A!}} \begin{vmatrix} \varphi_{\alpha_1}(1) & \dots & \varphi_{\alpha_A}(1) \\ \vdots & & \vdots \\ \varphi_{\alpha_1}(A) & \dots & \varphi_{\alpha_A}(A) \end{vmatrix} \quad (2.2)$$

aus. In der Sprache der zweiten Quantisierung, die wir hier ausschließlich verwenden werden, wird der entsprechende Zustand in der Form

$$|\Phi\rangle = \prod_{i=1}^A b_{\alpha_i}^{\dagger} |vac\rangle \quad (2.3)$$

dargestellt.

Durch diesen Ansatz ist das Verfahren auf die Bestimmung von Einteilchenzuständen festgelegt. Die Teilchen bewegen sich ohne Wechselwirkung in einem effektiven, im allgemeinen nichtlokalen Potential, das die ursprüngliche Wechselwirkung

zwischen den Teilchen in einer gewissen Näherung beschreibt.

Wenn die ursprüngliche Wechselwirkung im Falle der Anwendung auf die Kernphysik einen hard core enthält, ist der Ansatz einer Determinante nicht verwertbar. Aus diesem Grunde beschränkt man sich entweder auf Zweikörperwechselwirkungen ohne hard core oder man muß das schwierigere Problem einer BHF - Rechnung in Angriff nehmen.

Wenn das effektive Einteilchenpotential sphärische Symmetrie besitzt, kann man den HF - Zustand als Grundzustand interpretieren. Im Falle eines "deformierten" Einteilchenpotentials interpretiert man den HF - Zustand als einen intrinsischen Zustand, aus dem sich die Grundzustandsbande durch Drehimpulsprojektion gewinnen läßt (siehe Kapitel III).

Die Hamiltonfunktion des Vielteilchensystems hat die Form Einteilchen- plus Zweiteilchenanteil

$$H = \sum_i h_i + \frac{1}{2} \sum_{i,k} v_{ik} \quad (2.4)$$

Hier haben wir uns nicht festgelegt, ob der Einteilchenoperator nur die kinetische Energie  $h_i = t_i$  und die Zweiteilchenwechselwirkung die volle Wechselwirkung darstellt, oder ob wir die Aufspaltung Schalenmodell plus Restwechselwirkung im Sinne haben. Der Erwartungswert dieses Hamiltonoperators in Bezug auf die HF - Determinante (die sogenannte HF - Energie) ist

$$\langle \Phi | H | \Phi \rangle = \sum_{\alpha=1}^A \langle \alpha | h | \alpha \rangle + \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta=1}^A \langle \alpha\beta | v | \alpha\beta \rangle \quad (2.5)$$

Dabei sind  $\langle \alpha | h | \alpha \rangle$  die Matrixelemente des Einteilchenoperators in Bezug auf die HF - Basis, während  $\langle \alpha\beta | v | \alpha\beta \rangle$  die antisymmetrisierten Matrixelemente der (effektiven) Zweiteilchenwechselwirkung

darstellt. Die Summe läuft jeweils über die besetzten Zustände, also im Fall von  $\text{Ne}^{20}$  von  $\alpha, \beta = 1$  bis 4. Anstatt die Funktionen selbst zu bestimmen, entwickeln wir sie nach einem im Prinzip vollständigen Satz von Einteilchenzuständen. Das kann z.B. ein Satz von Schalenmodellzuständen im harmonischen Oszillator sein, der eindeutig durch die Quantenzahlen  $j = \{n, l, j, m, \tau\}$  beschrieben wird

$$|\alpha\rangle = \sum_j c_j^\alpha |j\rangle \quad (2.6)$$

Weiterhin fordern wir, daß die Zustände  $|\alpha\rangle$  orthonormal sind, also die Bedingungen

$$\sum_j c_j^{\alpha*} c_j^{\alpha'} = \delta_{\alpha\alpha'} \quad \text{und} \quad \sum_\alpha c_j^{\alpha*} c_{j'}^\alpha = \delta_{jj'} \quad (2.7)$$

erfüllen. Mit diesem Ansatz erhalten wir die HF - Energie

$$\begin{aligned} \langle \Phi | H | \Phi \rangle &= \sum_{\alpha=1}^A \sum_{j,j'} c_j^{\alpha*} \langle j | h | j' \rangle c_{j'}^\alpha + \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta=1}^A \sum_{j,j'} \sum_{j_1,j_2} c_j^{\alpha*} c_{j_1}^{\beta*} \\ &\quad \cdot \langle jj_1 | v | j'j_2 \rangle c_{j_1}^\alpha c_{j_2}^\beta \end{aligned} \quad (2.8)$$

Die geforderte Variation ist dann eine Variation nach den Entwicklungskoeffizienten. Die Bedingungen (2.7) werden durch einen Lagrangemultiplikator  $e_\alpha$  angekoppelt

$$\frac{\partial}{\partial c_j^{\alpha*}} \left[ \langle \Phi | H | \Phi \rangle - e_\alpha \sum_j c_j^{\alpha*} c_j^\alpha \right] = 0 \quad (2.9)$$

Setzen wir Gl. (2.8) in Gl. (2.9) ein und führen die vorgeschriebenen Differentiationen aus, ergibt sich nach Umordnen der Terme folgende Grundgleichung für die numerischen Rechnungen

$$\sum_{j'} \left[ \langle k | h | j' \rangle + \sum_{\beta=1}^A \sum_{j_1,j_2} c_{j_1}^{\beta*} \langle kj_1 | v | j'j_2 \rangle c_{j_2}^\beta \right] c_{j'}^\gamma = e_\gamma c_k^\gamma \quad (2.10)$$

Die nichtlinearen Gleichungen haben die Form eines Eigenwertproblems und werden durch Iteration numerisch gelöst.

Durch Ausnutzung gewisser Symmetrieeigenschaften des Problems läßt sich die praktische Verwertung von Gl. (2.10) vereinfachen. Aus diesem Grund wollen wir als Nächstes die Symmetrien des Systems untersuchen. In unserem Fall betrachten wir (a) Achsialsymmetrie, (b) Zeitumkehrsymmetrie und (c) Isospinsymmetrie.

- (a) Da sich die niedrigsten Energieniveaux im experimentellen Spektrum von  $\text{Ne}^{20}$  recht gut durch die Formel  $E_i = \frac{1}{20} J_i (J_i + 1)$  wiedergeben lassen, kann man den Kern in guter Näherung als achsialsymmetrisch betrachten. Das bestätigt sich auch dadurch, daß die energetisch niedrigste Lösung des HF - Problems diese Symmetrie aufweist. Achsialsymmetrie bedeutet, daß die Orbitale Eigenzustände von  $J_z$  sind ( $j = \{n, l, j, \tau\}$ )

$$|\alpha\rangle = \sum_j c_j^\alpha |j m_\alpha\rangle \quad (2.11)$$

Damit ist die Entwicklung von  $|\alpha\rangle$  eingeschränkt auf Zustände mit gegebenem  $m_\alpha$ . Wenn der Ansatz für das HF - Potential diese Symmetrie besitzt, weist auch die iterative Lösung dieselbe Symmetrie auf. Für ein nichtsymmetrisches HF - Potential besteht sowohl die Möglichkeit eine nichtsymmetrische wie auch eine Lösung spezieller Symmetrie zu erhalten. Andererseits ist es nicht möglich von einem symmetrischen Ansatz ausgehend, eine nichtsymmetrische Lösung zu finden.

- (b) In gg-Kernen erhalten wir durch Anwendung des Zeitum-

kehroperators T auf jedes besetzte Orbital

$$|\alpha\rangle = \sum_{jm} c_{jm}^{\alpha} |jm\rangle \quad (2.12)$$

den zeitungekehrten Zustand

$$\begin{aligned} |\bar{\alpha}\rangle &= T|\alpha\rangle = \sum_{jm} c_{jm}^{\alpha*} (-)^{j-m} |j, -m\rangle \\ &= \sum_{jm} c_{j-m}^{\alpha*} (-)^{j+m} |j, m\rangle \end{aligned} \quad (2.13)$$

so daß

$$\overline{c_{jm}^{\alpha}} = c_{j-m}^{\alpha*} (-)^{j+m} \quad (2.14)$$

Da die Matrixelemente des effektiven Potentials reell sind, können wir die Entwicklungskoeffizienten ebenfalls reell wählen. Das bedeutet, daß die Zeitumkehroperation einer Rotation um den Winkel  $\pi$  entspricht. Damit erhalten wir eine zweifach entartete Lösung, denn ein Zustand hat dieselbe Energie wie der zu ihm zeitungekehrte.

- (c) Wir nehmen an, daß die nuklearen Kräfte ladungsunabhängig sind, d.h. das Potential verhält sich im Isospinraum wie ein Skalar. Weil wir je zwei Protonen und zwei Neutronen betrachten, erwarten wir, daß sich bei einem Austausch von Protonen und Neutronen die Energie nicht ändert. Das liefert eine weitere zweifache Entartung durch die Isospininvarianz. Im Zusammenhang mit der Zeitumkehrinvarianz hat das HF - Problem unter diesen Umständen vierfach entartete Lösungen.

Solche Überlegungen treffen jedoch nur dann zu, wenn sowohl der Zustand  $|\alpha\rangle$  wie auch der zeitungekehrte Zustand  $|\bar{\alpha}\rangle$  im Fall der Zeitumkehrinvarianz, und der Protonenzustand sowie der Neutronenzustand für Isospininvarianz im HF - Grundzustand

besetzt sind. Nur dann kommutiert das HF - Feld mit den entsprechenden Operatoren und die Zustände sind entartet.

## II.2 Nebenbedingungen

Im nächsten Schritt diskutieren wir das HF - Variationsprinzip mit zusätzlich eingeführten Nebenbedingungen. Hier gibt es zwei Wege, die Nebenbedingungen zu verwerten. Wir wollen versuchen, die beiden Alternativen an Hand einer formalen Betrachtung zu verdeutlichen. Wir suchen die HF - Lösungen für einen modifizierten Hamiltonian der Form  $H - aZ$ , wobei  $-aZ$  die Nebenbedingung darstellt.  $Z$  sei unser Operator und  $a$  ein Variationsparameter. Ursprünglich wurde der Parameter  $a$  dann so gewählt, daß man einen bestimmten Erwartungswert des Operators  $Z$  erhielt (z.B. Cranking Modell<sup>10)11)</sup>). Wegen des beschränkten Ansatzes für die Vielteilchenwellenfunktion muß diese nicht zwangsläufig eine Eigenfunktion des Operators  $Z$  sein. Durch geeignete Wahl des Parameters  $a$  läßt sich jedoch wenigstens der korrekte Mittelwert bestimmen. Die Energien werden dann wieder in Bezug auf den ursprünglichen Hamiltonian  $H$  berechnet. Die andere Möglichkeit, die sich hier bietet, ist die Nebenbedingung als Basisgenerator zu verwenden. Dabei ist der Erwartungswert weniger von Interesse. Durch Variation des Parameters  $a$  über einen genügend weiten Bereich hinweg erzeugt man eine Schar von Lösungsfunktionen des modifizierten Hamiltonians. Durch weitere Variationsprinzipien (siehe Kapitel III) hofft man, aus der Menge der Lösungen schließlich zu einer besseren Beschreibung der intrinsischen Zustände zu gelangen. Die Klasse der möglichen Bedingungen ist beliebig groß. Dennoch sollte

man bestrebt sein, "physikalisch interpretierbare" Nebenbedingungen auszuwählen. Wir haben uns für die Zusatzoperatoren  $J^2$ , das Quadrat des Drehimpulsoperators, sowie für  $Q_{20}$ , das Quadrupolmoment, entschieden.

(a)  $J^2$  - Nebenbedingung

Der modifizierte Hamiltonoperator  $H_J$  wird geschrieben als

$$H_J = H - A_J J^2 \quad (2.15)$$

wobei  $H_J$  in den HF - Gleichungen an die Stelle von  $H$ , dem ursprünglichen Hamiltonian, tritt. Der Operator  $J^2$  wird in der Sprache der zweiten Quantisierung in der Schalenmodellbasis dargestellt durch

$$J^2 = \sum_{\alpha\beta} \langle \alpha | j^2 | \beta \rangle a_{\alpha}^{\dagger} a_{\beta} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle \alpha\beta | j \cdot j | \gamma\delta \rangle a_{\alpha}^{\dagger} a_{\beta}^{\dagger} a_{\delta} a_{\gamma} \quad (2.16)$$

Die Berechnung der Matrixelemente liefert die beiden Terme Einteilchenanteil:  $j_a(j_a+1) \delta_{\alpha\beta} \delta_{j_a j'_a}$  (2.17)

Zweiteilchenanteil (Spin - Isospin gekoppelte antisymmetrisierte Version):

$$\left\{ \begin{matrix} j_a & j_a & 1 \\ j_b & j_b & J \end{matrix} \right\} \sqrt{j_a(j_a+1)j_b(j_b+1)(2j_a+1)(2j_b+1)} \quad (2.18)$$

$$\cdot \{ (-)^{j_a+j_b+J} \delta_{j_a j'_a} \delta_{j_b j'_b} - (-)^{1-T} \delta_{j_a j'_b} \delta_{j_b j'_a} \}$$

die in der Rechnung mit den entsprechenden Termen des Hamiltonians  $H$  zusammengefaßt wurden. Die in der vorliegenden Literatur <sup>12)</sup> gebräuchliche Interpretation besagt, daß  $A_J J^2$  als Rotationsenergie betrachtet wird. Durch Abziehen dieser Größe erhält man eine bessere Näherung für den intrinsischen Hamiltonian.

(b)  $Q_{20}$  - Nebenbedingung

Hier führen wir

$$H_Q = H - A_Q Q_{20} \quad (2.19)$$

ein.  $Q_{20}$  ist ein Einteilchenoperator

$$Q_{20} = \sum_{\alpha, \beta} \langle \alpha | r^2 Y_{20} | \beta \rangle a_{\alpha}^{\dagger} a_{\beta} \quad (2.20)$$

Bei der Berechnung der Matrixelemente verwenden wir Laguerre Polynome ohne Phasenfaktor <sup>13)</sup>. Ferner sind die Matrixelemente in Einheiten der harmonischen Oszillatorkonstanten  $b (= 1.65 \text{ fm})$  berechnet worden. Wir erhalten folgende Beiträge für den Radialanteil

$$\begin{aligned} \ell_1 = \ell_2 ; \quad n_1 = n_2 & \rightarrow 2n_1 + \ell_1 + \frac{3}{2} \\ \ell_1 = \ell_2 ; \quad n_1 = n_2 - 1 & \text{ kommt bei uns nicht vor} \\ \ell_1 = \ell_2 ; \quad n_1 = n_2 + 1 & \rightarrow \sqrt{(n_2 + \ell_1 + \frac{3}{2})(n_2 + 1)} \\ \ell_2 = \ell_1 - 2 ; \quad n_1 = n_2 & \rightarrow \sqrt{(n_1 + \ell_1 + \frac{1}{2})(n_1 + \ell_1 - \frac{1}{2})} \\ \ell_2 = \ell_1 - 2 ; \quad n_1 = n_2 - 1 & \rightarrow -2\sqrt{n_2(n_2 + \ell_1 - \frac{1}{2})} \\ \ell_2 = \ell_1 - 2 ; \quad n_1 = n_2 - 2 & \rightarrow \sqrt{n_2(n_2 - 1)} \end{aligned} \quad (2.21)$$

Diese Ergebnisse stimmen mit den Angaben von Ref.14 bis auf ein Vorzeichen überein, das auf die Definition der Laguerre Polynome zurückzuführen ist.

Die Wahl der Quadrupolnebenbedingung läßt sich folgendermaßen begründen. Eine deformierte HF - Lösung liefert einen von Null verschiedenen Erwartungswert des Quadrupoloperators. Damit ist die Deformation des Kerns festgelegt. Durch Einführung der Quadrupolnebenbedingung haben wir die Möglichkeit, die Deformation zu verändern.

(c)  $A_j J^2$  und  $A_q Q_{20}$  Nebenbedingung

Schließlich wollen wir beide Nebenbedingungen gemeinsam einführen. Die einzelnen Beiträge setzen sich aus den unter a) und b) angegebenen Termen zusammen. Die physikalische Argumentation verläuft ähnlich. Das experimentelle Energiespektrum zeigt für  $\text{Ne}^{20}$  eine Rotationsbande (siehe oben a)), ebenso wissen wir, daß der Kern deformiert ist (siehe oben b)). Dadurch, daß die Nebenbedingungen in einer Rechnung eingeführt werden, besteht die Möglichkeit beide Einflüsse zusammen zu berücksichtigen.

Die Ergebnisse der Untersuchungen werden in Kapitel IV diskutiert und zwar für den Testfall  $\text{Ne}^{20}$ , wo wir nochmals etwas ausführlicher auf die physikalische Bedeutung der Nebenbedingungen eingehen werden. Im nächsten Kapitel wollen wir uns zunächst mit der weiteren Verwertung der Ergebnisse für  $\text{Ne}^{20}$  beschäftigen, die wir durch den HF - Formalismus erhalten haben. Die Lösungen, die wir bisher gefunden haben, sind noch keine Zustände mit gutem Gesamtdrehimpuls  $J$ . Es besteht daher die Aufgabe, die HF - Zustände auf gutes  $J$  zu projizieren. Ferner müssen die Parameter  $A_j$  und  $A_q$  noch festgelegt werden. Das wird mit Hilfe eines weiteren Variationsverfahrens erzielt, das wir ebenfalls im nächsten Kapitel besprechen werden.

### III Ausbau des Formalismus

#### III.1 Projektion auf guten Gesamtdrehimpuls

Bis auf Ausnahmen (gestreckte Konfigurationen und abgeschlossene Schalen) wird für einen Zustand, der durch eine Determinante beschrieben wird, gelten daß

$$J^2 |\Phi\rangle = \hbar^2 j(j+1) |\Phi\rangle \quad (3.1)$$

Der HF - Zustand wird also im allgemeinen eine gut gemischte Überlagerung der Zustände mit gutem Drehimpuls sein, und wir können ihn schreiben als

$$\Phi = \sum_J C_J \Psi_J \quad (3.2)$$

wobei die Koeffizienten  $C_J$  - nicht zu verwechseln mit unseren HF - Entwicklungskoeffizienten - Entwicklungskoeffizienten in einer Basis zu gutem Drehimpuls sind. Es gibt verschiedene Techniken, diese Projektion auf Zustände mit gutem Drehimpuls durchzuführen, und damit die Eigenzustände  $\Psi_J$  des Drehimpulsoperators und ihr Gewicht  $C_J$  zu bestimmen. Einen recht ausführlichen Überblick über die gebräuchlichsten Projektionsmethoden bietet u.a. ein Artikel von G. Ripka <sup>15</sup> ).

Die wohl am besten bekannte Methode, um den Drehimpuls zu projizieren, ist die Hill Wheeler Integration <sup>16</sup> ). Dieses Integral geht auf Drehungen und damit auf die vertrauten Eulerwinkel zurück. Der Rotationsoperator  $R(\Omega)$  ist definiert durch

$$R(\Omega) = e^{-i\phi J_z} e^{-i\phi J_y} e^{-i\theta J_z} \quad (3.3)$$

mit  $\Omega = \phi, \phi, \theta$  (Eulerwinkel)

Die Rotationsmatrix  $D_{MM'}^J(\Omega)$  ist definiert als das Matrixelement von  $R(\Omega)$  in der  $| \alpha J M \rangle$  Basis

$$\langle \alpha J M | R(\Omega) | \alpha' J' M' \rangle = \delta_{\alpha\alpha'} \delta_{JJ'} D_{MM'}^J(\Omega) \quad (3.4)$$

Durch Inversion von (3.4) läßt sich der Rotationsoperator  $R(\Omega)$  auch schreiben als

$$R(\Omega) = \sum_{\alpha J M M'} |\alpha J M\rangle D_{MM'}^J(\Omega) \langle \alpha J M'| \quad (3.5)$$

Für die Rotationsmatrix gilt die folgende Orthogonalitätsrelation

$$\int d\Omega D_{M_1 M_1'}^{J_1*}(\Omega) D_{M_2 M_2'}^J(\Omega) = \delta_{J_1 J_2} \delta_{M_1 M_2} \delta_{M_1' M_2'} \frac{8\pi^2}{2J_1+1} \quad (3.6)$$

Multipliziert man Gl. (3.5) mit  $D_{MM}^{J*}(\Omega)$  und führt die Integration über  $\Omega$  aus, erhält man mit Gl. (3.6) einen Ausdruck für den Projektionsoperator  $P_M^J$

$$P_M^J = \sum_{\alpha} |\alpha J M\rangle \langle \alpha J M| = \frac{2J+1}{8\pi^2} \int d\Omega D_{MM}^{J*}(\Omega) R(\Omega) \quad (3.7)$$

Damit können wir die folgenden beiden Ausdrücke für die Projektion auf guten Drehimpuls aufstellen, wobei Gl. (3.9) zur Normierung dient

$$\langle \Phi | H P_M^J | \Phi \rangle = \frac{2J+1}{8\pi^2} \int d\Omega D_{MM}^{J*}(\Omega) \langle \Phi | H R(\Omega) | \Phi \rangle \quad (3.8)$$

und

$$\langle \Phi | P_M^J | \Phi \rangle = \frac{2J+1}{8\pi^2} \int d\Omega D_{MM}^{J*}(\Omega) \langle \Phi | R(\Omega) | \Phi \rangle \quad (3.9)$$

Im Fall von Achsialsymmetrie läßt sich sowohl der Rotationsoperator als auch die Rotationsmatrix weiter reduzieren, da

$$\langle \Phi | R(\Omega) | \Phi \rangle = e^{-i\alpha M} \langle \Phi | e^{-i\beta J_y} | \Phi \rangle e^{-i\gamma M}$$

und

$$D_{MM}^J(\Omega) = e^{-i\alpha M} \langle J M | e^{-i\beta J_y} | J M \rangle e^{-i\gamma M}$$

Damit können wir in Gl. (3.8) und Gl. (3.9) die reduzierten

Rotationsmatrizen (reell)

$$d_{MM'}^J(\theta) = \langle JM | e^{-i\theta J_y} | JM' \rangle \quad (3.10)$$

einführen und erhalten

$$\langle \Phi | H P_M^J | \Phi \rangle = \frac{2J+1}{2} \int_0^\pi \sin\theta \, d\theta \, d_{MM}^J(\theta) \langle \Phi | H e^{-i\theta J_y} | \Phi \rangle \quad (3.11)$$

bzw.

$$\langle \Phi | P_M^J | \Phi \rangle = \frac{2J+1}{2} \int_0^\pi \sin\theta \, d\theta \, d_{MM}^J(\theta) \langle \Phi | e^{-i\theta J_y} | \Phi \rangle \quad (3.12)$$

Nachdem man dann explizit eine Wellenfunktion eingeführt hat, lassen sich die erforderlichen Größen ohne Schwierigkeiten numerisch auswerten, da für die "kleinen" d-Funktionen ein geschlossener Ausdruck existiert.

Eine nächste Methode <sup>17)</sup> besteht in der wiederholten Anwendung des Operators

$$J_+ = J_x + iJ_y \quad (3.13)$$

auf die Entwicklung

$$|\Phi\rangle = \sum_{JM} P_M^J |\Phi\rangle = \sum_{JM} \alpha_{JM} |JM\rangle \quad (3.14)$$

Sei

$$(J_+)^n |JM\rangle = C_{nJM} |J, M+n\rangle$$

dann läßt sich zeigen, daß

$$C_{nJM}^2 = \frac{(J-M)!(J+M-n)!}{(J+M)!(J-M-n)!}$$

Unter Berücksichtigung der Achsialsymmetrie des HF - Zustandes  $|\Phi\rangle$  schreiben wir

$$J_z |\Phi\rangle = M |\Phi\rangle \quad \text{mit} \quad |\Phi\rangle = \sum_{J=|M|}^J \alpha_J |JM\rangle$$

und erhalten schließlich analog zu Gl. (3.11) bzw. Gl. (3.12)

$$\langle \Phi | (J_-)^n H (J_+)^n | \Phi \rangle = \sum_{J=|M|+n}^{J_{\max}} \alpha_J^2 C_{nJM}^2 E_J \quad (3.15)$$

bzw.

$$\langle \Phi | (J_-)^n (J_+)^n | \Phi \rangle = \sum_{J=|M|+n}^{J_{\max}} \alpha_J^2 C_{nJM}^2 \quad (3.16)$$

Um diesen Satz von Gleichungen für  $\alpha_J^2$  und  $E_J$  zu lösen, muß man die linke Seite der Gleichungen explizit aus dem bekannten HF - Zustand berechnen. Diese Methode scheitert bei wachsender Teilchenzahl, da  $J_{\max}$  sehr stark anwächst und eine sehr große Genauigkeit erforderlich ist, um  $\alpha_J^2$  sowie  $E_J$  aus den Gleichungen - auch schon für niedrige - J-Werte zu erhalten.

Die letzte Methode <sup>18)</sup>, die wir hier vorstellen wollen, besteht im expliziten Aufstellen der Basis  $|\alpha JM\rangle$  und der Berechnung des Skalarproduktes dieser Basis mit dem HF - Zustand  $|\Phi\rangle$ . Aus Gründen der Übersichtlichkeit wählen wir einen HF - Zustand bestehend aus zwei identischen Nukleonen in deformierten Bahnen eines achsialsymmetrischen Feldes. Wir gehen von der HF - Basis aus

$$|\Phi\rangle = b_{\mu}^{\dagger} b_{\mu}^{\dagger} |vac\rangle \quad (3.17)$$

und transformieren in die Oszillatorbasis

$$|\Phi\rangle = \sum_{j_1 j_2} c_{j_1}^{\mu} c_{j_2}^{\mu'} a_{j_1 m_{\mu}}^{\dagger} a_{j_2 m_{\mu'}}^{\dagger} |vac\rangle \quad (3.18)$$

Einen vollständigen Satz identischer Nukleonen können wir schreiben als

$$|j_1 j_2 JM\rangle = n_{12} \sum_{m_1 m_2} \begin{bmatrix} j_1 & j_2 & J \\ m_1 & m_2 & M \end{bmatrix} a_{j_1 m_1}^{\dagger} a_{j_2 m_2}^{\dagger} |vac\rangle \quad (3.19)$$

(die Klammer stellt einen Clebsch-Gordan Koeffizienten dar)

mit  $j_1 \geq j_2$  und  $n_{12} = 1/\sqrt{1+\delta_{j_1 j_2}}$ . Das Skalarprodukt mit  $|\Phi\rangle$  liefert dann sofort

$$\langle j_1 j_2 J M | \Phi \rangle = n_{12} c_{j_1}^{\mu} c_{j_2}^{\mu'} \begin{bmatrix} j_1 & j_2 & J \\ m_{\mu} & m_{\mu'} & M \end{bmatrix} - n_{12} c_{j_2}^{\mu} c_{j_1}^{\mu'} \begin{bmatrix} j_1 & j_2 & J \\ m_{\mu} & m_{\mu'} & M \end{bmatrix} \quad (3.20)$$

und der projizierte Zustand wird

$$P^J |\Phi\rangle = \sum_{j_1 \geq j_2} \langle j_1 j_2 J M | \Phi \rangle |j_1 j_2 J M\rangle \quad (3.21)$$

Diese Methode läßt sich auf eine größere Anzahl von Teilchen erweitern, wird dann allerdings entsprechend komplizierter.

In diesem kurzen Überblick erheben wir keinerlei Anspruch auf Vollständigkeit. Weitere Methoden lassen sich in der Literatur ohne Schwierigkeiten sowohl für achsialsymmetrische <sup>19)</sup> wie auch für nichtachsialsymmetrische <sup>20)</sup> Probleme finden.

Unabhängig davon für welche Methode man sich entscheidet, stößt man für größere Systeme auf erhebliche technische sowie numerische Schwierigkeiten, so daß man auch bei der Projektion zu Näherungsmethoden greifen muß (s. a. Ref.19 bzw. Ref.20 ).

Da wir jedoch lediglich das "Vierteilchensystem"  $Ne^{20}$  betrachten wollen, läßt sich die Projektion formal ohne große Anstrengungen durchführen. Wir verwenden eine modifizierte Version der zuletzt geschilderten Methode und diskutieren sie nochmals für unser spezielles Problem.

Da wir auf jeder Seite lediglich einen Vierteilchenzustand haben, können wir die Projektion relativ einfach mit Hilfe der direkten Drehimpulskopplung durchführen. Der HF - Zustand in der HF - Basis ist gegeben durch

$$|\Phi\rangle = b_{\alpha_1 p}^{\dagger} b_{\alpha_2 p}^{\dagger} b_{\alpha_3 n}^{\dagger} b_{\alpha_4 n}^{\dagger} |vac\rangle \quad (3.22)$$

(wobei p, n Protonen bzw. Neutronen bezeichnen)

und wird durch

$$b_{\alpha_i}^{\dagger} = \sum_{j_m} c_{j_m}^{\alpha_i} a_{j_m}^{\dagger} \quad (3.23)$$

in die Oszillatorbasis transformiert

$$|\Phi\rangle = \sum_{\substack{j_1 \dots j_4 \\ k_1 \dots k_4}} c_{j_1 k_1}^{\alpha_1} c_{j_2 k_2}^{\alpha_2} c_{j_3 k_3}^{\alpha_3} c_{j_4 k_4}^{\alpha_4} a_{j_1 k_1}^{\dagger p} a_{j_2 k_2}^{\dagger p} a_{j_3 k_3}^{\dagger n} a_{j_4 k_4}^{\dagger n} |vac\rangle \quad (3.24)$$

Wir definieren die Operatoren

$$A_{J_{12}, K_{12}}^{\dagger}(j_1, j_2) = \sum_{k_1, k_2} \begin{bmatrix} j_1 & j_2 & J_{12} \\ k_1 & k_2 & K_{12} \end{bmatrix} a_{j_1 k_1}^{\dagger} a_{j_2 k_2}^{\dagger} \quad (3.25)$$

und

$$B_{J', K'}^{\dagger}(J_{12}, J_{34}) = \sum_{K_{12}, K_{34}} \begin{bmatrix} J_{12} & J_{34} & J' \\ K_{12} & K_{34} & K' \end{bmatrix} A_{J_{12}, K_{12}}^{\dagger}(j_1, j_2) \cdot A_{J_{34}, K_{34}}^{\dagger}(j_3, j_4) \quad (3.26)$$

Die Umkehrung der Relationen (3.25) und (3.26) wird in Gl. (3.24) eingearbeitet und man erhält damit für  $\langle \Phi | P_M^J | \Phi \rangle$  den folgenden Ausdruck

$$\begin{aligned} \langle \Phi | P_M^J | \Phi \rangle = & \sum_{\substack{j_1 j_2 j_3 j_4 \\ j_1' j_2' j_3' j_4' \\ J_{12} J_{34} J_{12}' J_{34}'}} \begin{bmatrix} j_1 & j_2 & J_{12} \\ k_1 & k_2 & K_{12} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j_3 & j_4 & J_{34} \\ k_3 & k_4 & K_{34} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} J_{12} & J_{34} & J \\ K_{12} & K_{34} & K \end{bmatrix} \\ & \cdot \begin{bmatrix} j_1 & j_2 & J_{12} \\ k_1 & k_2 & K_{12} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j_3 & j_4 & J_{34} \\ k_3 & k_4 & K_{34} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} J_{12} & J_{34} & J' \\ K_{12} & K_{34} & K' \end{bmatrix} \\ & \cdot c_{j_1 k_1}^{\alpha_1 *} c_{j_2 k_2}^{\alpha_2 *} c_{j_3 k_3}^{\alpha_3 *} c_{j_4 k_4}^{\alpha_4 *} \\ & \cdot \langle vac | B_{J_{12}', K_{12}'}(J_{12}', J_{34}') P_M^J B_{J_{12}, K_{12}}^{\dagger}(J_{12}, J_{34}) | vac \rangle \\ & \cdot c_{j_1 k_1}^{\alpha_1} c_{j_2 k_2}^{\alpha_2} c_{j_3 k_3}^{\alpha_3} c_{j_4 k_4}^{\alpha_4} \quad (3.27) \end{aligned}$$

Durch Auswertung der Kommutatoren für die neu eingeführten Operatoren

$$[A_{J_{12}, K_{12}}^p(j_1', j_2'), A_{J_{12}, K_{12}}^{\dagger p}(j_1, j_2)] = \delta_{J_{12}, J_{12}} \delta_{K_{12}, K_{12}} \\ \cdot [\delta_{j_1 j_1'} \delta_{j_2 j_2'} - (-)^{j_1 + j_2 - J_{12}} \delta_{j_1 j_2'} \delta_{j_2 j_1'}]$$

$$[A_{J_3', K_3'}^n(j_3', j_4'), A_{J_{12}, K_{12}}^p(j_1, j_2)] \\ = [A_{J_{12}, K_{12}}^p(j_1', j_2'), A_{J_3', K_3'}^n(j_3, j_4)] \equiv 0$$

$$[A_{J_3', K_3'}^n(j_3', j_4'), A_{J_3, K_3}^{\dagger n}(j_3, j_4)] = \delta_{J_3, J_3'} \delta_{K_3, K_3'} \\ \cdot [\delta_{j_3 j_3'} \delta_{j_4 j_4'} - (-)^{j_3 + j_4 - J_3} \delta_{j_3 j_4'} \delta_{j_4 j_3'}]$$

und mit Hilfe der Definition des Projektionsoperators erhalten wir folgendes in Protonen und Neutronen symmetrisches Endergebnis

$$\langle \Phi' | P_0^J | \Phi \rangle = \sum_{j_1 j_2 j_3 j_4} \begin{bmatrix} J_{12} & J_3 & J \\ K_{12} & K_3 & K \end{bmatrix} \begin{bmatrix} J_{12} & J_3 & J \\ K_{12} & K_3 & K \end{bmatrix} \\ \cdot \{ c_{j_3 k_3}^{\alpha_3} c_{j_4 k_4}^{\alpha_4} \begin{bmatrix} j_3 & j_4 & J_3 \\ k_3 & k_4 & K_3 \end{bmatrix} (c_{j_3 k_3}^{\alpha_3'} c_{j_4 k_4}^{\alpha_4'} \begin{bmatrix} j_3 & j_4 & J_3 \\ k_3 & k_4 & K_3 \end{bmatrix} \\ - c_{j_4 k_3}^{\alpha_3'} c_{j_3 k_4}^{\alpha_4'} \begin{bmatrix} j_3 & j_4 & J_3 \\ k_4 & k_3 & K_3 \end{bmatrix}) \} \{ c_{j_1 k_1}^{\alpha_1} c_{j_2 k_2}^{\alpha_2} \begin{bmatrix} j_1 & j_2 & J_{12} \\ k_1 & k_2 & K_{12} \end{bmatrix} \\ \cdot (c_{j_1 k_1}^{\alpha_1'} c_{j_2 k_2}^{\alpha_2'} \begin{bmatrix} j_1 & j_2 & J_{12} \\ k_1 & k_2 & K_{12} \end{bmatrix} - c_{j_2 k_1}^{\alpha_1'} c_{j_1 k_2}^{\alpha_2'} \begin{bmatrix} j_1 & j_2 & J_{12} \\ k_2 & k_1 & K_{12} \end{bmatrix}) \} \quad (3.28)$$

Wenn wir den Erwartungswert des Hamiltonoperators berechnen,

$$\langle \Phi | H P_K^J | \Phi \rangle$$

haben wir dabei benutzt, daß der Projektionsoperator mit dem Hamiltonian vertauscht, und daß  $(P_K^J)^2 = P_K^J$  ist. In der Berechnung verfahren wir so, daß wir eine vollständige Zwischensumme einfügen

$$\langle \Phi | H P_0^J | \Phi \rangle = \sum_{\Phi'} \langle \Phi | H | \Phi' \rangle \langle \Phi' | P_0^J | \Phi \rangle \quad (3.29)$$

Die Matrixelemente von  $\langle \Phi | H | \Phi' \rangle$  werden im Appendix angegeben. Die Vorschrift zur Berechnung der Matrixelemente  $\langle \Phi' | P_0^J | \Phi \rangle$  haben wir in Gl. (3.28) explizit hergeleitet. Nun wenden wir uns dem Variationsprinzip zu.

### III.2 Weitere Variationsprinzipien

Die Tatsache, daß man mit dem direkten HF - Verfahren den energetisch niedrigsten intrinsischen Zustand bestimmt, ist der Ausgangspunkt für verschiedene Anstrengungen, eine realistischere Darstellung des wirklichen Grundzustands zu erhalten. Eine Verbesserung über die soeben beschriebene Variation vor Projektion (VBP) ist die Variation nach der Projektion (VAP). Dabei behandelt man das Variationsprinzip

$$\delta \frac{\langle \Phi | H P^J | \Phi \rangle}{\langle \Phi | P^J | \Phi \rangle} = 0 \quad (3.30)$$

Die komplizierten Darstellungen der beiden Matrixelemente erlauben die Durchführung nur für relativ einfache Fälle <sup>8)</sup>. Selbst dann, wenn der Zustand, aus dem man projiziert, eine Slaterdeterminante ist, bleibt das Verfahren auf kleine Teilchenzahlen beschränkt.

Die physikalische Aussage, die man sich mit dem entspre-

chenden numerischen Aufwand erkaufte, ist: Der zu bestimmende "intrinsische Zustand"  $|\Phi_J\rangle$  ist für jeden J-Wert verschieden. Auf diese Weise ist man in der Lage, z.B. Änderungen in der Dichteverteilung auf Grund der Rotation des Kerns zu erfassen. Die Schwierigkeiten der vollen VAP werden etwas eingeschränkt, wenn man anstelle der allgemeinen intrinsischen Zustände  $|\Phi_J\rangle$  einparametrische Scharen von Zuständen, wie z.B. wir sie durch ein HF - Verfahren mit Nebenbedingungen gewonnen haben, verwendet. Man hat dann die Aufgabe, eine Methode anzugeben, die für jeden J-Wert den optimalen Zustand  $|\Phi(a)\rangle$  auswählt.

Um diese optimale Lösung zu finden, bieten sich zwei mögliche und wie wir meinen auch sinnvolle Wege an.

1.) Bestimmung des Minimums der Energie aus

$$E_p(a) = \frac{\langle \Phi(a) | H P_0^J | \Phi(a) \rangle}{\langle \Phi(a) | P_0^J | \Phi(a) \rangle} \quad (3.31)$$

für jeden J-Wert.

2.) Bestimmung des Minimums des mittleren Schwankungsquadrates

$$\frac{\langle \Phi(a) | H^2 P_0^J | \Phi(a) \rangle}{\langle \Phi(a) | P_0^J | \Phi(a) \rangle} - \frac{\langle \Phi(a) | H P_0^J | \Phi(a) \rangle^2}{\langle \Phi(a) | P_0^J | \Phi(a) \rangle^2} \approx \min \quad (3.32)$$

für jeden J-Wert.

In beiden Fällen ist H der ursprüngliche Hamiltonoperator ohne Nebenbedingungen. Hiermit haben wir die Nebenbedingungen lediglich dazu benutzt, um neue Wellenfunktionen zu erzeugen. Unter diesem Gesichtspunkt interpretieren wir die Parameter der genannten Zusatzterme (siehe Kapitel II.2) als Generatorkoordinaten.

Bevor wir uns ausführlich mit der zweiten Gleichung

beschäftigen, wollen wir kurz auf Gl. (3.31) eingehen. Bei HF - Rechnungen ohne Nebenbedingungen erhalten wir für jeden J - Wert lediglich den Punkt  $\lambda=0$ , der nicht notwendigerweise den tiefsten Wert der jeweiligen Energiekurve repräsentiert. Durch die Nebenbedingungen können wir den Kurvenverlauf über einen größeren Bereich darstellen und so für jeden J - Wert ein Minimum finden.

Betrachten wir nun Punkt 2.) zunächst ohne Projektion

$$\langle \Phi(a) | H^2 | \Phi(a) \rangle - \langle \Phi(a) | H | \Phi(a) \rangle^2 \approx \min \quad (3.33)$$

$|\Phi(a)\rangle$  beschreibt den HF - Grundzustand für einen jeweils festen Parameterwert  $a$ . Der Ausdruck  $\langle \Phi(a) | H | \Phi(a) \rangle^2$  ist daher nichts anderes als das Quadrat der HF - Energie in Abhängigkeit vom Parameter  $a$ . Etwas komplizierter wird es bei der Berechnung des ersten Terms in Gl. (3.33). Die Matrixelemente mit  $H^2$  werden - ähnlich wie bei der Projektion (s. Gl. (3.29)) - durch Einschieben einer vollständigen Zwischensumme bestimmt

$$\langle \Phi(a) | H^2 | \Phi(a) \rangle = \sum_{\Phi'(a)} \langle \Phi(a) | H | \Phi'(a) \rangle \langle \Phi'(a) | H | \Phi(a) \rangle \quad (3.34)$$

Ohne Projektion kann die Zwischensumme bis zu 2 Teilchen-2 Loch - Zustände berücksichtigen, da der Hamiltonian ein Zweiteilchenoperator ist. Obwohl wir immer noch keine Projektion auf guten Gesamtdrehimpuls durchgeführt haben, wird das Minimum der Kurve in der Regel nicht mehr bei einem Parameterwert  $a=0$  liegen.

Die Verwendung des mittleren Schwankungsquadrates können wir auch mit dem Lanczos - Algorithmus begründen, der schon in vielen Rechnungen Anwendung gefunden hat. Da sich aus dieser Methode bis zu einem gewissen Punkt der Ausdruck für das mittlere

Schwankungsquadrat ableiten läßt, möchten wir sie im Folgenden kurz diskutieren.

Ursprünglich <sup>21)</sup> war es ein rein mathematischer Formalismus, der eine tridiagonale Darstellung generierte. Sei A eine reelle  $n \times n$  Matrix und  $v_1$  ein normierter Vektor, dann lassen sich die Vektoren  $v_2, v_3$  usw. iterativ durch folgende Vorschrift konstruieren <sup>22)</sup>

$$\begin{aligned} A v_1 &= \alpha_1 v_1 + \beta_1 v_2 \\ A v_2 &= \beta_1 v_1 + \alpha_2 v_2 + \beta_2 v_3 \\ A v_3 &= \beta_2 v_2 + \alpha_3 v_3 + \beta_3 v_4 \\ &\vdots \\ A v_n &= \beta_{n-1} v_{n-1} + \alpha_n v_n \end{aligned} \quad (3.35)$$

In 3.35 kann A auch durch einen hermiteschen Operator, z.B. H, und die Vektoren  $v_1, v_2$  usw. durch Zustände  $|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle$  usw. im Hilbertraum ersetzt werden. Durch dieses Verfahren wird eine vollständige Basis aufgebaut und die Diagonalisation der entstandenen tridiagonalen Matrix liefert die Eigenwerte des Operators H <sup>23)</sup>. Im Weiteren beschränken wir uns auf den ersten Iterationsschritt

$$H|\phi_1\rangle = h_{11}|\phi_1\rangle + h_{12}|\phi_2\rangle \quad (3.36)$$

$$\rightarrow |\phi_2\rangle = \frac{1}{h_{12}} (H|\phi_1\rangle - h_{11}|\phi_1\rangle) \quad (3.37)$$

wobei  $h_{12}$  gegeben ist durch

$$h_{12}^2 = (\langle\phi_1|H - h_{11}\langle\phi_1|)(H|\phi_1\rangle - h_{11}|\phi_1\rangle) \quad (3.38)$$

Diese Gleichungen ergeben sich aus der Forderung, daß

$\langle\phi_1|\phi_2\rangle = 0$  und  $\langle\phi_1|\phi_1\rangle = 1$  sind.

Daraus folgt

$$h_{11} = \langle\phi_1|H|\phi_1\rangle \quad (3.39)$$

Wir erhalten nach Einsetzen dieser Beziehung in Gl. (3.38)

$$h_{12}^2 = \langle \Phi_1 | H^2 | \Phi_1 \rangle - \langle \Phi_1 | H | \Phi_1 \rangle^2 \quad (3.40)$$

Wir sehen also, daß mittlere Schwankungsquadrat ist in Lanczos-Algorithmus enthalten, denn dieser Ausdruck ist identisch mit Gl. (3.33). Wenn es für den gegebenen Ansatz möglich wäre, die Größe  $h_{12}^2$  zum verschwinden zu bringen, hätte man einen Eigenzustand gefunden.

Dieses Verfahren können wir jetzt noch durch Projektion auf guten Drehimpuls  $J$  erweitern

$$HP_0^J |\Phi_1\rangle = h_{11} P_0^J |\Phi_1\rangle + h_{12} P_0^J |\Phi_2\rangle \quad (3.41)$$

An dieser Stelle müssen wir allerdings auch die Normierung, die durch den Projektionsoperator hinzukommt, der auf die Zustände  $|\Phi_1\rangle$  wirkt, berücksichtigen. Wegen der besseren Übersicht führen wir die projizierten und normierten Zustände

$$|\Phi_1'\rangle = \frac{P_0^J |\Phi_1\rangle}{\sqrt{\langle \Phi_1 | P_0^J | \Phi_1 \rangle}} \quad (3.42)$$

ein, verfahren wie oben und erhalten

$$h_{12}^2 = \langle \Phi_1' | H^2 | \Phi_1' \rangle - \langle \Phi_1' | H | \Phi_1' \rangle^2 \quad (3.43)$$

oder, wenn wir wieder auf  $\Phi_1$  zurückgreifen, denselben Ausdruck wie bei Punkt 2.) (Gl. (3.32))

$$h_{12}^2 = \frac{\langle \Phi_1 | H^2 P_0^J | \Phi_1 \rangle}{\langle \Phi_1 | P_0^J | \Phi_1 \rangle} - \frac{\langle \Phi_1 | H P_0^J | \Phi_1 \rangle^2}{\langle \Phi_1 | P_0^J | \Phi_1 \rangle^2} \quad (3.44)$$

Genaugenommen müßten wir hier wieder  $|\Phi(a)\rangle$  schreiben, denn wir verwenden in diesem Variationsverfahren die mit Hilfe der Nebenbedingungen erzeugten Wellenfunktionen.

Hat man die Minima für die beiden Variationsverfahren gefunden, muß man sich entscheiden, welcher der beiden Methoden man den Vorzug geben möchte. In unserem Fall liegen die entsprechenden Minima, wie wir später (siehe Kapitel IV.2) sehen werden, sehr nahe zusammen, so daß die Entscheidung zwischen den beiden Methoden nicht sehr kritisch ist.

Ob und wie weit diese Modifikationen Verbesserungen mit sich bringen, werden wir im zweiten Teil des nächsten Kapitels an Hand der Ergebnisse untersuchen. In dem ersten Teil werden zunächst die reinen HF - Ergebnisse angegeben.

## IV. Ergebnisse und Diskussion

### IV.1 Praktische Durchführung einer HF - Rechnung

Bevor wir die HF - Ergebnisse besprechen, geben wir die Eingabewerte an und zeigen einen Weg, wie wir sie sinnvoll wählen können.

Für unsere Rechnungen haben wir als Restwechselwirkung eine Gaußkraft mit Rosenfeldbeimischung angenommen

$$V = V_0 e^{-\left(\frac{r}{\mu}\right)^2} \frac{\vec{r}_1 \cdot \vec{r}_2}{3} (0.3 + 0.7 \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2) \quad (4.1)$$

wobei  $\mu = 1.166$  fm war.

Sicherlich könnte man realistischere Potentiale wählen, da wir hier aber vor allen Dingen die Anwendbarkeit des Formalismus testen wollen, sollte dieser Ansatz genügen. Ferner sind VAP - Rechnungen mit diesem Potential durchgeführt<sup>8)</sup> worden, so daß sich die Möglichkeit bietet, diese Ergebnisse in Zusammenhang mit unseren Resultaten zu stellen. Mit der Einführung der Restwechselwirkung haben wir auch  $\langle \alpha | h | \alpha \rangle$  als Einteilchenenergie festgelegt. Bei der Berechnung gehen wir von der Annahme aus, daß man  $\text{Ne}^{20}$  als Vierteilchenproblem mit  $\text{O}^{16}$  als abgeschlossener Schale behandeln kann. Aus stripping Experimenten und der Berechnung der Differenz der Bindungsenergien zwischen  $\text{O}^{16}$  und  $\text{O}^{17}$  sowie  $\text{O}^{16}$  und  $\text{Ca}^{40}$  erhält man die Einteilchenenergien in der 2s1d-Schale, wobei die Rechnung mit Oszillatorzuständen durchgeführt wurde. Auf diese Weise läßt sich eine konsistente Wahl der Eingabeparameter erreichen.

Wir benötigen also die relativen Einteilchenenergien für

die  $d_{\frac{5}{2}}$ ,  $s_{\frac{1}{2}}$  und  $d_{\frac{3}{2}}$  Orbitale in  $\text{Ne}^{20}$ , sowie die Potentialtiefe  $V_0$  und Anfangswerte für die iterative Bestimmung der Entwicklungskoeffizienten  $c$ . Zur Berechnung von  $V_0$  und den Einteilchenenergien verwende man die Lösung von  $\text{Ca}^{40}$ , wo die Energien der Orbitale durch

$$e_j = \epsilon_j + V_0 \sum_{\mu=1}^{24} \langle j m \tau, \mu | v | j m \tau, \mu \rangle \quad (4.2)$$

gegeben sind. Die Energien  $e_j$  werden aus pickup Experimenten an  $\text{Ca}^{40}$  bestimmt.

$$e_{\frac{5}{2}} = -21.73 \text{ MeV} \quad e_{\frac{1}{2}} = -18.20 \text{ MeV} \quad e_{\frac{3}{2}} = -15.73 \text{ MeV}$$

Die Differenz der Bindungsenergien zwischen  $\text{Ca}^{40}$  und  $\text{O}^{16}$  läßt sich schreiben als

$$-274 \text{ MeV} = 2 \sum_j (2j+1) \epsilon_j + \frac{1}{2} V_0 \sum_{\mu\mu'=1}^{24} \langle \mu\mu' | v | \mu\mu' \rangle \quad (4.3)$$

Das Gleichungssystem (4.2) und (4.3) wird für  $\epsilon_j$  und  $V_0$  gelöst und man erhält

$$\epsilon_{\frac{5}{2}} = -6.369 \text{ MeV} \quad \epsilon_{\frac{1}{2}} = -2.304 \text{ MeV} \quad \epsilon_{\frac{3}{2}} = -0.369 \text{ MeV}$$

und  $V_0 = 41.76 \text{ MeV}$ .

Damit haben wir die relativen Einteilchenenergien in  $\text{Ca}^{40}$  bestimmt. Betrachtet man nun die Werte für  $\text{O}^{16}$  ( $\epsilon_{d_{\frac{5}{2}}} = -4.14 \text{ MeV}$ ;  $\epsilon_{s_{\frac{1}{2}}} = -3.27 \text{ MeV}$ ;  $\epsilon_{d_{\frac{3}{2}}} = 0.94 \text{ MeV}$ ) im Vergleich mit den Ergebnissen für  $\text{Ca}^{40}$ , stellt man keine allzu starken Schwankungen fest. Für die dazwischenliegenden Kerne in der s-d Schale sollte man daher ein vernünftiges Ergebnis erwarten können, wenn man zwischen diesen beiden Grenzen linear interpoliert. Das liefert dann für  $\text{Ne}^{20}$  die relativen Einteilchenenergien

$$\epsilon_{d_{\frac{5}{2}}} = -4.51 \text{ MeV} \quad \epsilon_{s_{\frac{1}{2}}} = -3.11 \text{ MeV} \quad \epsilon_{d_{\frac{3}{2}}} = 0.71 \text{ MeV}$$

An dieser Stelle sei erwähnt, daß die Resultate doch recht empfindlich von der Wahl der Eingabeparameter abhängen. Führen wir die Rechnungen mit diesen Größen durch, sind die Energiedifferenzen um einen Faktor  $\sim 1.3$  zu klein. Aus diesem Grund haben wir im Folgenden nur mit den Daten aus Ref. 8 gearbeitet.

$$V_0 = 53.25 \text{ MeV}$$

$$\epsilon_{\frac{5}{2}} = -4.14 \text{ MeV} \quad \epsilon_{\frac{1}{2}} = -3.27 \text{ MeV} \quad \epsilon_{\frac{3}{2}} = 0.94 \text{ MeV}$$

Um sinnvolle Startwerte für die Entwicklungskoeffizienten zu wählen, nehmen wir eine Abschätzung für die Deformation<sup>24)</sup> von  $\text{Ne}^{20}$  vor, da sich die Koeffizienten mit der Deformation ändern

$$\beta^2 = \frac{2.4 \cdot 10^5}{A^{\frac{5}{2}} E(2^+) [\text{keV}]} \quad (4.4)$$

wobei

$$A^{\frac{5}{2}} (\text{Ne}^{20}) = 1.8 \cdot 10^3 \quad \text{und} \quad E(2^+; \text{Ne}^{20}; \text{keV}) = 1630 \text{ keV}$$

Damit ergibt sich

$$\beta = 0.28 \text{ bzw. } \delta = 0.27$$

Die Werte wurden aus einer Tabelle<sup>25)</sup> für  $\delta=0.3$  abgelesen.

Für  $k = \frac{1}{2}$  finden wir

| $\ell$ | $j$           | $c$    |
|--------|---------------|--------|
| 0      | $\frac{1}{2}$ | -0.532 |
| 2      | $\frac{3}{2}$ | -0.306 |
| 2      | $\frac{5}{2}$ | .788   |

Die Werte für  $k=-\frac{1}{2}$  erhalten wir unter Verwendung der Zeitumkehrsymmetrie aus der Beziehung  $\bar{c}_{jk} = c_{j-k} (-)^{j+k}$ .

Mit den so gewählten Anfangsgrößen erhält man für den HF - Grundzustand folgende auf Grund der Symmetrien vierfach entartete Lösung:

Einteilchenenergie: -15.965 MeV

Entwicklungskoeffizienten ( $k=\frac{1}{2}$ ):

$$c_{5/2} = .71499 \quad c_{1/2} = -.57733 \quad c_{3/2} = -.39431$$

HF-Energie: -38.0502 MeV

Für den Fall eines nichtachsialsymmetrischen Ansatzes und einer stationären nichtachsialen Lösung liegt die HF-Energie bei -27.264 MeV, so daß die achsialsymmetrische Lösung tatsächlich den energetisch tiefsten Zustand repräsentiert.

#### IV.2 "Optimales" HF

Jetzt erweitern wir die HF - Lösung auf eine Lösungsmenge durch die Berücksichtigung der in Kapitel II.2 eingeführten Nebenbedingungen. Wir betrachten jede Nebenbedingung getrennt und werden nochmals einen Versuch zur physikalischen Interpretation dieser Größen unternehmen. Die numerischen Ergebnisse werden jeweils im Minimum angegeben. Der gesamte Kurvenverlauf läßt sich aus den Zeichnungen entnehmen. Die HF - Energie definieren wir als den Erwartungswert des Hamiltonians ohne Nebenbedingungen zwischen den HF - Zuständen, die durch die Zusatzterme erzeugt wurden.

$$E_{\text{HF}}(a) = \langle \phi(a) | H | \phi(a) \rangle \quad (4.5)$$

Das mittlere Schwankungsquadrat sowohl ohne Projektion als auch mit Projektion (s. Gl'n. (3.33) bzw. (3.32)) läßt sich als Maß für die Güte der berechneten Wellenfunktionen interpretieren<sup>26)</sup>. Erst durch die Projektion auf guten Drehimpuls erhalten wir

mit  $h^2 12 \text{proj.}$  die in unserem Modell beste intrinsische Wellenfunktion für einen speziellen  $J$  - Wert.  $h^2 12$  ist eine positiv definite Größe und kann im Fall einer Eigenfunktion Null werden.

Die projizierten Energien  $E_p$  sind gegeben durch

$$E_J(a) = \frac{\langle \Phi(a) | H P_0^J | \Phi(a) \rangle}{\langle \Phi(a) | P_0^J | \Phi(a) \rangle} \quad (4.6)$$

Die relativen Energien  $\Delta E_p$  erhalten wir durch

$$\Delta E_J = E_J(a) - E_0(a) \quad (4.7)$$

Die Ergebnisse werden in den Tabellen gegeben.

#### IV.2a $A_j J^2$ -Nebenbedingung

Die Matrixelemente von  $J^2$  wurden in Kapitel II.2 gegeben. Der Parameter  $A_j$  durchläuft die Werte  $-0.5$  bis  $+0.5$  mit einer Schrittweite von  $0.1$  und hat die Dimension einer Energie (MeV). Hier arbeiten wir - wie auch bei den folgenden Nebenbedingungen - mit dem achsialsymmetrischen Ansatz für  $k=\frac{1}{2}$  und untersuchen, wie sich die HF - Lösung unter dem Einfluß der Zusatzbedingungen und der Wahl des Parameters  $A_j$  verändert.

Durch Abziehen des Terms  $A_j J^2$  hofft man, eine bessere Beschreibung der intrinsischen Wellenfunktion zu erhalten<sup>27)</sup>. Eine Begründung dafür läßt sich durch die Rotationsspektren von gg-Kernen geben. Das Spektrum von gg-Kernen kann man durch die einfache Formel  $E_J = \lambda J(J+1)$  recht gut annähern. Der Proportionalitätsfaktor  $\lambda$  wird dabei als  $1/2\Theta$  (mit  $\hbar^2 = 1$ ) interpretiert, wobei  $\Theta$  das Trägheitsmoment des Kerns darstellt. Betrachten wir jetzt den Term  $A_j J^2$ , den wir von  $H$  abziehen, können wir folgendermaßen argumentieren. Die Eigenwerte von  $J^2$  sind  $J(J+1)$  und den Parameter  $A_j$  können wir mit dem Proportio-

nalitätsfaktor  $\lambda$  identifizieren. Also liegt es nahe, den Term  $A_j J^2$  als Rotationsanteil des Hamiltonoperators zu deuten und eine bessere intrinsische Beschreibung des Systems durch Abzug dieses Terms zu erhalten. Untersuchungen dieser Art <sup>12,27)</sup>, die aber mehr auf die Bestimmung des Trägheitsmoments ausgerichtet sind, unterscheiden sich von unserem Standpunkt insofern, als dort jedem J-Wert derselbe Parameterwert  $A_j$  zugeordnet wird. Wir hingegen versuchen, zu jedem J-Wert einen charakteristischen Wert der Variablen  $A_j$  zu bestimmen. Dennoch können wir sagen, daß unsere Ergebnisse im Mittel mit den oben angeführten Rechnungen in Einklang sind. Andererseits dürfen wir diesem Vergleich nicht allzu viel Gewicht geben, denn bei der weiteren Rechnung greifen wir auf den ursprünglichen Hamiltonian  $H$  zurück, während z.B. bei der Berechnung des Trägheitsmomentes der modifizierte Hamiltonian  $H - A_j J^2$  verwendet wird. Die vorausgegangenen Betrachtungen sollten lediglich zeigen, daß wir die Wahl dieser Bedingung begründen können. Wir weisen nochmals darauf hin, daß wir die Nebenbedingungen zur Erzeugung neuer Basisfunktionen eingeführt haben. Aus diesem Grund ist es auch nicht sinnvoll, die relativen Energien von Ref.27 direkt mit unseren Resultaten zu vergleichen. Wir wollen herausfinden, ob man unsere Ergebnisse zwischen VBP und VAP einordnen kann. Dazu ziehen wir solche Werte zum Vergleich heran, die durch VAP - Rechnungen <sup>8)</sup> entstanden sind.

In Fig. 1 sind die Hartree-Fock Energien EHF und das unprojizierte mittlere Schwankungsquadrat  $h^2_{12}$  in Abhängigkeit vom Parameter  $A_j$  aufgetragen. Wir erkennen eine Verschiebung des Minimums von  $A_j=0$  (bei EHF) zu  $A_j=0.1$  (in  $h^2_{12}$ ). Eine weitere

Besonderheit tritt in der Kurve für EHF bei  $A_j = -.5$ , für  $h^{212}$  schon bei  $A_j = -.4$  auf. Wir beobachten eine Konstanz bzw. ein Umklappen der Daten. An dieser Stelle können wir nochmals auf die physikalische Interpretation von  $A_j$  als  $1/20$  zurückgreifen. Das Trägheitsmoment ist nur sinnvoll, wenn wir ihm einen positiven Wert zuordnen können. Daher erwarten wir das Minimum bei positiven Werten des Parameters und schließen die Lösungen im negativen Bereich als unphysikalisch aus, da sie einem negativen Trägheitsmoment entsprechen würden. Setzt man die Kurven dennoch in den negativen Bereich hinein fort, müssen wir auf die physikalische Interpretation verzichten. Hier gilt für das oben erwähnte Verhalten der Kurven dann dasselbe Argument, das uns bei der Quadrupolnebenbedingung auch begegnen wird: Der Zusatzterm stellt in  $H_{\text{eff}} = H - A_j J^2$  den dominanten Term dar, und wir können die Lösungen nicht mehr in der von uns angestrebten Form verwerten. Noch deutlicher erkennen wir diese Tatsache bei dem projizierten mittleren Schwankungsquadrat in Fig. 2, ebenso wie bei den projizierten Energien in Fig. 3. Hier finden wir nur bis  $A_j = -.3$  Lösungen. Jenseits dieses Wertes erhalten wir außer einem  $J=0$  Anteil allenfalls noch eine Information über  $J=2$ . Höhere  $J$  - Werte treten nicht mehr auf. Weiterhin müssen wir leider feststellen, daß wir für den höchstmöglichen  $J$  - Wert in  $\text{Ne}^{20} - J=8$  - kein Minimum mehr bestimmen können. Die Kurve verläuft sehr flach und man erkennt einen Wendepunkt, aber gelangt nicht zu einem Minimum. Die Begründung dafür müssen wir in den numerischen Rechnungen suchen. Man dividiert sehr kleine Zahlen durcheinander, was zu einem relativ großen Fehler führen kann.

Es existiert noch eine zweite Lösung für  $k=\frac{5}{2}$  - Startwerte. Die HF - Energie liegt bei ca. -27 MeV, also so hoch, daß wir keine Mischung in die  $k=\frac{1}{2}$  - Lösung befürchten müssen. Die nicht-achsialsymmetrische Lösung liegt ebenfalls bei -27 MeV und damit auch wieder zu hoch, um die Ergebnisse zu beeinflussen.

#### IV.2b $A_q Q_{20}$ - Nebenbedingung

Die Zusatzterme zum Hamiltonian H wurden in Kapitel II.2 gegeben. Der Parameter  $A_q$  erfaßt hier einen größeren Bereich. Wir variieren  $A_q$  von -6.0 bis +10.0 mit einer Schrittweite von 1.0, wobei die Größen so gewählt wurden, daß  $A_q$  ebenfalls die Dimension einer Energie (MeV) hat.

Das Quadrupolmoment ist eng mit der Deformation des Kerns verknüpft. Ein positiver Erwartungswert von  $Q_{20}$  deutet auf eine prolate Deformation, während ein negativer Erwartungswert auf oblate Deformation hinweist.

In Fig. 4 sind die HF - Energien aufgetragen. Wir haben bei dieser Nebenbedingung auch die zweite achsiale Lösungsschar ( $k=\frac{5}{2}$ ) und die nichtachsialen Lösungen eingezeichnet. Wir unterscheiden demnach hier drei Fälle. Für die  $k=\frac{1}{2}$  - Startwerte erhalten wir erwartungsgemäß die niedrigste Lösung. Die Kurve verläuft sehr flach und besitzt ein Minimum bei  $A_q=0.0$ . Weiterhin erkennen wir, daß die Funktion zwischen  $A_q = -2.$  und  $A_q = -3.$  eine Unstetigkeit aufweist und für  $A_q = -6.$  in eine  $k=\frac{5}{2}$  -Lösung übergeht. Ein Kriterium dafür in welchem Gebiet der Deformation wir uns befinden, gibt wie oben erwähnt, der Erwartungswert des Quadrupolmoments. Betrachten wir die Kurve unter diesem Gesichtspunkt, ergibt sich folgendes: Für den tieferen Ast der

Kurve ist der Erwartungswert des Qadrupolmoments bis einschließ-  
 lich  $A_Q = -2$ . positiv und hat einen Wert von ca. 4.9. Ab  $A_Q = -3$ .  
 ist diese Größe negativ, der Zahlenwert ist ca. -2.4, obwohl  
 die Lösungen bis auf den Punkt  $A_Q = -6$ . immer noch  $k=\frac{1}{2}$  -Symmetrie  
 aufweisen. Hier können wir noch deutlicher, schon an Hand der  
 HF - Energien erkennen, daß uns die Nebenbedingung von der  
 prolaten Lösung über eine "Zwischenstufe" in eine oblate Lösung  
 führt, die ca. um 10 MeV höher liegt. Beginnt man andererseits  
 mit einer oblaten Deformation, also  $k=\frac{5}{2}$  - Startwerten, erhält  
 man im Bereich von  $A_Q = -6$ . bis  $A_Q = +2$ . oblate Lösungen  
 ( $\langle Q_{20} \rangle \approx -2.5$ ). Hier tritt die Unstetigkeit zwischen  $A_Q = +2$ .  
 und  $A_Q = +3$ . auf, denn  $A_Q = +3$ . ist wieder eine prolate Lösung  
 ( $\langle Q_{20} \rangle \approx +4.9$ ). Hier tritt keine "Zwischenlösung" wie vorher  
 auf. Ein ähnliches Phänomen wird in Ref.28 diskutiert. Man hat  
 die beiden Äste für prolate und oblate Deformationen berechnet  
 und stellt fest, daß die Kurven nicht stetig ineinander über-  
 gehen. Einen direkten Vergleich mit unseren Ergebnissen können  
 wir leider nicht durchführen, da in dieser Veröffentlichung  
 keine genauen Aussagen über die Wahl der Parameter gemacht werden.  
 Schließlich sehen wir noch den Kurvenverlauf für die nicht-  
 achsiale Lösung und stellen fest, daß der Energieunterschied  
 so groß ist, daß wir keinen Einfluß auf die  $k=\frac{1}{2}$  - Lösungen  
 befürchten müssen. In Fig. 5 haben wir wieder das unprojizierte  
 mittlere Schwankungsquadrat aufgetragen. Das Minimum ist wieder-  
 um zu einem positiven Parameterwert hin ( $A_Q = +1.0$ ) verschoben.  
 Jenseits von  $A_Q = -2$ . zeigt sich auch hier an dem Sprung im  
 Kurvenverlauf, daß die Lösungen durch den Einfluß der Neben-

bedingung aus dem Gebiet der prolaten Deformation herausgetragen wurden. Interessanter ist es jedoch, das in Fig. 6 aufgetragene projizierte mittlere Schwankungsquadrat zu betrachten. Für  $J=0,2$  und  $4$  läßt sich das Minimum ohne Schwierigkeiten bestimmen. Bei  $J=6$  können wir keine eindeutige Aussage mehr machen, denn dort wo wir das Minimum vermuten, befinden wir uns nicht mehr in einem wohldefinierten Gebiet. Über  $J=8$  können wir ähnlich wie bei der ersten Nebenbedingung keine Information erhalten. Fig. 7 gibt den Verlauf der projizierten Energien wieder. Die Kurven sind sämtlich sehr flach, Minima lassen sich aus der Zeichnung nur äußerst schwer erkennen. Aus dieser Figur kann man aber eindeutig ablesen, daß die oben erwähnte "Zwischenlösung" in keiner Beziehung zu den von uns gesuchten Lösungen steht. Es ist anzunehmen, daß die Nebenbedingung in diesen Bereichen den dominanten Term von  $H_{\text{eff}} = H - A_q Q_{20}$  darstellt, und somit den Kurvenverlauf bestimmt. Durch die Überbetonung des Zusatzterms wurde ein neuer Lösungsbereich zugänglich, der zwar physikalisch sinnvoll, aber in unserer Betrachtungsweise nicht verwendbar ist.

#### IV.2c $A_j J^2$ und $A_q Q_{20}$ - Nebenbedingung

Schließlich haben wir als Abschluß dieses Zyklus untersucht, wie sich die Lösungen verhalten, wenn wir beide Nebenbedingungen zusammen einführen. Hier wird  $A_j$  von  $0.0$  bis  $0.5$  mit einer Schrittweite von  $0.1$  und  $A_q$  von  $-2.0$  bis  $+5.0$  mit einer Schrittweite von  $1.0$  variiert. Die Kurven sind in Fig. 8 bis Fig. 14 gegeben. Wir haben darauf verzichtet, die HF - Energien aufzutragen, und beginnen in Fig. 8 mit dem unprojizierten

mittleren Schwankungsquadrat. Die Zeichnungen sind sämtlich so zu verstehen, daß man jeweils die Ebene in den entsprechenden Parameterwerten zeichnet und diese Blätter dann hintereinanderstellt. Dadurch wollen wir versuchen, dem Betrachter einen räumlichen Eindruck zu vermitteln. In Fig. 9 bis Fig. 14 finden wir das projizierte mittlere Schwankungsquadrat für die  $J$  - Werte 0, 2, 4 und 6. Die Kurven für  $J=8$  wurden nicht gezeichnet, da wir für diesen Wert keine Minima erhalten können. Fig. 13 und Fig. 14 zeigen schließlich den Verlauf der projizierten Energien. Hier mußte ein sehr kleiner Maßstab gewählt werden, da die Kurven abermals recht flach verlaufen und man lediglich auf diesem Umweg eine Struktur erkennen kann.

Diese Rechnungen geben uns die Möglichkeit, die Wellenfunktionen unter Berücksichtigung von zwei Generatorkoordinaten anzugeben. Eine ähnliche Untersuchung <sup>29)</sup> wurde bereits durchgeführt. Die Ergebnisse stimmen in groben Zügen überein. Unsere Werte für die projizierten Energien liegen geringfügig höher. Andererseits können wir aus unseren Resultaten keinen "anti-stretching" - Effekt ablesen. Eine tiefergehende Diskussion erscheint nicht angezeigt, da die Einzelheiten der Methode sowie Angaben zur Wahl der Potentialparameter wohl auf Grund der Tatsache, daß es sich um einen Konferenzbericht handelt, nicht näher ausgeführt wurden.

#### IV.2d Berechnung der $B(E2)$ - Werte

Zum Abschluß haben wir die  $B(E2)$  - Werte für die gefundenen Minima berechnet. Dabei sind zwei Punkte zu beachten.

a) Wir definieren die  $B(E2)$  - Werte als das Betragsquadrat der reduzierten Matrixelemente des Quadrupoloperators zwischen den Zuständen  $i$  (initial) und  $f$  (final). In der Reduktion des Matrixelements folgen wir der Konvention von Talmi<sup>30)</sup>, wobei der elektrische Quadrupoloperator mit dem von Ref. 31 identisch ist

$$Q_2 = (\tilde{e}_p + \tilde{e}_n) \sum_{k=1}^A \frac{1}{2} r_k^2 Y_2(\Omega_k) + (\tilde{e}_p - \tilde{e}_n) \sum_{k=1}^A t_z(k) r_k^2 Y_2(\Omega_k) \quad (4.8)$$

wobei  $\tilde{e}_p = 1.5 e$  und  $\tilde{e}_n = 0.5 e$  gesetzt wurde.

b) Bei der praktischen Berechnung gehen wir folgendermaßen vor. Wir entnehmen dem projizierten mittleren Schwankungsquadrat für jeden  $J$  - Wert das Minimum und suchen die entsprechende Slaterdeterminante heraus. Danach projizieren wir auf jeder Seite den benötigten  $J$  - Wert und berechnen das Matrixelement mit dem Quadrupoloperator

$$\langle \Phi(a_1) | P_0^{J+2} Q_{20} P_0^J | \Phi(a_2) \rangle = \langle f, J+2, 0, \alpha | Q_{20} | i, J, 0, \beta \rangle \quad (4.9)$$

Die Doppelprojektion ist notwendig, da der Projektionsoperator in diesem Fall nicht mit dem Quadrupoloperator vertauscht und wir auf jeder Seite eine andere Determinante stehen haben. Der  $B(E2)$  - Wert folgt dann durch nachträgliche Reduktion des Matrixelements

$$B(E2)_{i \rightarrow f} = \frac{1}{2J_i + 1} \left| \frac{\langle f, J+2, 0, \alpha | Q_{20} | i, J, 0, \beta \rangle}{\begin{pmatrix} J_f & 2 & J_i \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}} \right|^2 \quad (4.10)$$

Die Größen in Gl. (4.9) und (4.10) sind die magnetische Quantenzahl 0, alle anderen Quantenzahlen  $\alpha$  und  $\beta$  außer  $J$  und  $M(=0)$  und im Nenner von Gl. (4.10) ein  $3j$ -Symbol.

Bei der Projektion ist zu beachten, daß wir zwar das Verfahren von Kapitel III.1 anwenden können, jedoch zuvor eine Transformation in die Oszillatorbasis durchführen müssen, da jetzt links und rechts nicht mehr dieselben Determinanten stehen. Der Ausdruck (3.28) geht infolgedessen über in

$$\begin{aligned}
 \langle \Phi' | P_0^J | \Phi \rangle &= \delta_{KK'} \sum_{J_1 J_2 J_3 J_4} \begin{bmatrix} J_{12} & J_3 & J \\ K_{12} & K_3 & K \end{bmatrix} \begin{bmatrix} J_{12} & J_3 & J \\ K_{12} & K_3 & K \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j_1 & j_2 & J_{12} \\ k_1 & k_2 & K_{12} \end{bmatrix} \\
 &\cdot \begin{bmatrix} j_3 & j_4 & J_3 \\ k_3 & k_4 & K_3 \end{bmatrix} \left\{ \begin{bmatrix} j_1 & j_2 & J_{12} \\ k_1 & k_2 & K_{12} \end{bmatrix} \delta_{j_1 j_1'} \delta_{j_2 j_2'} \right. \\
 &- \begin{bmatrix} j_1 & j_2 & J_{12} \\ k_2 & k_1 & K_{12} \end{bmatrix} \delta_{j_2 j_1'} \delta_{j_1 j_2'} \left. \left\{ \begin{bmatrix} j_3 & j_4 & J_3 \\ k_3 & k_4 & K_3 \end{bmatrix} \delta_{j_3 j_3'} \delta_{j_4 j_4'} \right. \right. \\
 &- \left. \left. \begin{bmatrix} j_3 & j_4 & J_3 \\ k_4 & k_3 & K_3 \end{bmatrix} \delta_{j_4 j_3'} \delta_{j_3 j_4'} \right\} \right\} \quad (4.11)
 \end{aligned}$$

Unsere Ergebnisse sowie theoretische und experimentelle Vergleichswerte <sup>32)</sup> sind in Tabelle 3 gegeben. Leider müssen wir feststellen, daß lediglich der erste Übergang (0 → 2) ein vernünftiges Resultat liefert. Höhere Übergangsstärken können wir nicht mit ausreichender Genauigkeit reproduzieren. Das gilt sowohl für die reine Hartree-Fock Rechnung als auch für die Rechnungen mit Nebenbedingungen.

Die Ergebnisse der Abschnitte IV.2a bis IV.2d spiegeln sich auch in den Tabellen wieder. In Tabelle 1 stellen wir eine vergleichende Betrachtung zwischen einer VAP - Rechnung und unseren VBP - Ergebnissen für die verschiedenen Nebenbedingungen an. Nach dem J - Wert in Spalte 1 geben wir in Spalte 2 und 3 die relativen Energien bzw. Energiedifferenzen,

hervorgegangen aus einer VAP - Rechnung an. In den folgenden Spalten ist eine Zusammenfassung von Tabelle 2 unserer Ergebnisse aufgeschrieben. Der Energieunterschied von ca. 7 MeV zwischen VAP und VBP ist auf die Berücksichtigung der Coulombkorrektur in der VAP - Rechnung zurückzuführen (durch konstante Verschiebung der Protoneneinteilchenenergien), die wir in unserer Betrachtungsweise vernachlässigt haben. Die folgenden Spalten geben das projizierte mittlere Schwankungsquadrat, die Energie und die Energiedifferenz jeweils im Minimum für die verschiedenen Nebenbedingungen an. Die Varianz schwankt für denselben J - Wert von Nebenbedingung zu Nebenbedingung nur geringfügig. Auch die Energien liegen in derselben Größenordnung. Somit können wir in den Energiedifferenzen lediglich Änderungen nach dem Komma erwarten. Bei der Quadrupolnebenbedingung haben wir die Ergebnisse für J=6 und J=8 in Klammern gesetzt, da sie zwar den tiefsten Punkt der Kurve, jedoch nicht dem Minimum entsprechen, das wir auf Grund der Unstetigkeit im Kurvenverlauf nicht erreichen können. Für die anderen Nebenbedingungen fehlen die Werte für J=8, da sie mit zu großen, durch die Numerik entstandenen Fehlern versehen sind. In Tab. 2 haben wir nach Nebenbedingung getrennt sämtliche Ergebnisse der jeweiligen Rechnung zusammengestellt. Dabei sind die Lösungen für  $k=\frac{1}{2}$  Achsialsymmetrie angegeben. Hier läßt sich abermals verfolgen, wie sich die Minima im Laufe der Rechnungen verschieben. Aus dieser Tabelle können wir auch den jeweiligen Parameterwert des Minimums ablesen. Weiterhin haben wir die Entwicklungskoeffizienten im Minimum für den entsprechenden Parameterwert hinzugefügt, so daß wir auf diese Art die Änderung der Wellenfunktionen verfolgen können. Tabelle 2d gibt schließlich die

Ergebnisse der VAP - Rechnung ausführlich wieder. Hier sind zusätzlich noch die reinen HF - Ergebnisse ohne Nebenbedingungen enthalten. Diese Energien bzw. Energiedifferenzen sind mit  $E'$  bzw.  $\Delta E_{VBP}$  bezeichnet. In Tabelle 3 werden die Ergebnisse für die  $B(E2)$  - Werte gegeben. Dabei ist für den Vergleich mit anderen Literaturstellen zu beachten, daß die Beziehung  $B(E2; i \rightarrow f) = 5 B(E2; f \rightarrow i)$  in unserer Notation gilt. Spalte 1 und 2 geben die Ausgangs- bzw. Endzustände an. In Spalte 3 stehen die Ergebnisse für eine reine HF - Rechnung ohne Nebenbedingungen. Die folgenden 3 Spalten berücksichtigen den Einfluß der Zusatzterme und die beiden letzten Spalten dienen zum Vergleich mit anderen theoretischen und experimentellen Werten.

#### IV.2e Ergebnisse und Modell

Betrachten wir unsere Ergebnisse untereinander, läßt sich erkennen, daß alle Nebenbedingungen grob gesehen zu denselben Aussagen führen. Das Minimum in der HF - Energie liegt immer bei dem Parameterwert Null. Das projizierte mittlere Schwankungsquadrat zeigt eine erhebliche Verbesserung der Wellenfunktionen gegenüber dem unprojizierten mittleren Schwankungsquadrat. Die Minima der projizierten Energien stimmen bis auf geringfügige Abweichungen mit den Minima in der Varianz überein. Sollte bei einer zukünftigen Anwendung eine größere Abweichung auftreten, bietet sich folgende Möglichkeit an. Man suche zunächst das Minimum im projizierten mittleren Schwankungsquadrat auf und lese bei diesem Parameterwert in der Energiekurve die zugehörige Energie ab. Das gilt jedoch nur, wenn keine allzu großen Differenzen auftreten. Andernfalls ist es ein Hinweis dafür,

daß die Wellenfunktionen im Ansatz nicht gut genug sind.

Eine etwas genauere Untersuchung gibt der Quadrupolnebenbedingung trotz ihres eingeschränkten Lösungsbereiches den Vorzug. Sowohl in Bezug auf eine reine HF - Rechnung mit anschließender Projektion als auch im Vergleich zur Projektion vor Variation liefert diese Nebenbedingung die besten Resultate. Hier sind wir bei einem wesentlichen Punkt angelangt. Wir verfolgen das Ziel, ein Verfahren anzugeben, mit dem wir den Formalismus der Projektion vor Variation annähern können. Der Nachteil unserer Methode ist allerdings, daß wir für höhere  $J$  - Werte ( $J=6$  und  $J=8$ ) - wenn es uns überhaupt gelingt - nur sehr ungenaue Angaben machen können. Andererseits sind die Antworten, die wir aus dieser Vorschrift auf verhältnismäßig einfache Art und Weise erhalten, durchaus zufriedenstellend. Unter diesem Aspekt erscheint die doch wesentlich mehr Aufwand erfordernde Projektion vor Variation nicht unbedingt notwendig um ein qualitativ gutes Ergebnis zu erhalten. Das gilt umso mehr, wenn man bedenkt, daß eine reine Projektion vor Variation im Vergleich zu experimentellen Werten genauso gut oder schlecht ist wie unsere Resultate. Will man eine weitere Annäherung an die gemessenen Daten erhalten, muß man auch beim VAP - Formalismus versuchen, die Lösungen durch das Einführen von Nebenbedingungen zu verbessern<sup>32)</sup>. Die Ergebnisse werden dann mit Bezug auf die Energien besser.

Der Vergleich der  $B(E2)$  - Werte für die verschiedenen Zwangsbedingungen und die reine HF - Rechnung liefert ein einheitliches Bild. Auch hier möchte man der Quadrupolnebenbedingung wieder den Vorzug geben. Für den Übergang vom ersten angeregten

Zustand zum Grundzustand ( $J=2 \rightarrow J=0$ ) erhalten wir eine gute Übereinstimmung mit Theorie und Experiment. Alle anderen Übergänge können wir weder mit anderen Rechnungen noch mit gemessenen Daten in Einklang bringen.

Zusammenfassend stellen wir fest, daß unser einfaches Verfahren mit Hinblick auf die Energien zufriedenstellende Resultate liefert, die Wellenfunktionen jedoch nicht gut genug wiedergegeben werden, so daß unser Modell bei der Berechnung von Übergangswahrscheinlichkeiten, den ersten Übergang ausgenommen, nicht zu richtigen Aussagen führt. Auf Grund der Tatsache, daß die Rechnungen sämtlich auf die sd-Schale beschränkt sind, würden wir diese Resultate für die höheren Übergänge auch erwarten. Die in unserem Modell berücksichtigten Konfigurationen nehmen mit wachsendem Drehimpuls sehr stark ab.

## V. Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wurde versucht, mit Hilfe eines erweiterten Variationsansatzes ein optimales HF - Verfahren für Rotationsbanden in gg-Kernen anzugeben. Zu diesem Zweck wurden Nebenbedingungen eingeführt und im Sinne von Generatorkoordinaten interpretiert. In einem weiteren Variationsverfahren wurden nach einer Projektion auf guten Drehimpuls Minima in der Varianz gesucht. Gleichzeitig wurden die projizierten Energien berechnet. Die Resultate der projizierten Energien wurden im Minimum der Varianz betrachtet und mit einer Rechnung der Projektion vor Variation verglichen. Die Anwendung wurde am Beispiel von  $\text{Ne}^{20}$  durchgeführt. Man behandelte  $\text{Ne}^{20}$  als vier Teilchen Problem in der sd-Schale, wobei der  $\text{O}^{16}$  Rumpf als unveränderlich angenommen wurde. Das Potential wurde durch eine Gaußkraft mit Rosenfeldbeimischung gegeben. Der Vergleich mit Resultaten aus einer Rechnung mit Projektion vor Variation liefert trotz der Einfachheit des angesetzten Modellraumes eine gute Übereinstimmung. Es liegt nahe, unsere Ergebnisse so zu interpretieren, daß man die intrinsische Struktur der Zustände durch die Nebenbedingungen besser beschrieben hat. Unter diesem Gesichtspunkt lassen sich die durchgeführten Überlegungen als eine Methode ansehen, die - mit der Einschränkung bezüglich hoher Drehimpulse - für diesen Kern gleichrangig zur Projektion vor Variation ist. Die  $B(E2)$  - Werte, berechnet aus dem modifizierten HF - Verfahren, lassen sich bis auf den ersten Übergang weder mit Theorie noch mit Experiment in Einklang bringen, was erkennen läßt, daß die Wellenfunktionen doch mehr Struktur haben, als mit diesem Modell

angenommen und beschrieben werden kann.

In Zukunft sollte dieses Verfahren in Bereichen Anwendung finden, die sich mit einer VAP - Rechnung gar nicht oder nur unter sehr großen Schwierigkeiten mit den gegenwärtig zur Verfügung stehenden Techniken erreichen lassen. Im Besonderen denken wir z.B. an den Kern  $\text{Mg}^{24}$  oder an Kerne im Gebiet der seltenen Erden.

## Literaturverzeichnis

- 1) Siehe u.a. D.R. Hartree; Proc. Cambr. Phil. Soc. 24(1928)89  
und V. Fock; Z. Physik 61(1930)126
- 2) M.G. Mayer und J.H.D. Jensen; Elementary Theory of Nuclear  
Shell Structure, J. Wiley & Sons, New York 1955
- 3) R. Jastrow; Phys. Rev. 98(1955)1479
- 4) J.L. Gammel, K.A. Brueckner; Phys. Rev. 109(1958)1023
- 5) K.A. Brueckner, C.A. Levinson, H.M. Mahmoud; Phys. Rev.  
95(1954)217 sowie B. Day; Rev. Mod. Phys. 39(1967)719
- 6) G. Ripka; The Hartree Fock Theory of Deformed Light Nuclei  
in M. Baranger, E. Vogt; Advances in Nuclear Physics Vol. 1,  
Plenum Press N.Y. 1968 p 183 ff.
- 7) T.H. Schucan, H.A. Weidenmüller; Ann. Phys. (USA) 73(1972)108  
und Ann. Phys. (USA) 76(1973)483  
T.T.S. Kuo, G.E. Brown; Nucl. Phys. 85(1966)40
- 8) R. Dreizler, P. Federman, B. Giraud and E. Osnes; Nucl.  
Phys. A113(1968)145
- 9) Fizika; Vol.5, 1973
- 10) G.E. Brown; Unified Theory of Nuclear Models and Forces,  
North Holland Publishing Company, Amsterdam 1967
- 11) D.R. Inglis; Phys. Rev. 96(1954)1059 und Phys. Rev. 103(1956)  
1786
- 12) C.A. Levinson; Phys. Rev. 132(1963)2184
- 13) T.A. Brody and M. Moshinsky; Tables of Transformation Brackets,  
Gordon & Breach Science Publishers, 2<sup>nd</sup> edition 1967
- 14) G. Baumgärtner, P. Schüch; Kernmodelle, BI-Taschenbuch  
(203/203a), Mannheim 1968

- 15) G. Ripka; The Hartree-Fock Theory and Nuclear Deformations,  
in Boulder Lectures in Theoretical Physics, Vol. VIIIC, 1965,  
p 237ff.
- 16) D.L. Hill, J.A. Wheeler; Phys. Rev. 89(1953)1106
- 17) P.O. Löwdin; Phys. Rev. 97(1955)1474 sowie Adv. Phys. 5(1956)1  
und Rev. Mod. Phys. 36(1964)966
- 18) I. Kelson; Phys. Rev. 132(1963)2189
- 19) H.A. Lamme, E. Boeker; Nucl. Phys. A111(1968)492 und Nucl.  
Phys. A136(1969)609
- 20) A. Watt; Nucl. Phys. A159(1970)202
- 21) C. Lanczos; J. Res. Natl. Bur. Std. (U.S.) 45(1950)255
- 22) R.R. Whitehead; Nucl. Phys. A182(1972)290
- 23) T. Sebe, J. Nachamkin; Ann. Phys. 51(1969)100
- 24) A.S. Davydov; Theorie des Atomkerns, VEB Deutscher Verlag  
der Wissenschaften, Berlin 1963, p 79.
- 25) B.E. Chi; Nucl. Phys. 83(1966)97
- 26) J.C. Parikh, J.P. Svenne; Phys. Rev. C6(1972)34
- 27) I. Kelson, C.A. Levinson; Phys. Rev. 134(1964)B269
- 28) J. LeTourneux; Recent Results in Constrained Hartree-Fock  
Calculations in Proceedings International Conference on  
Properties of Nuclear States, Montreal, Canada, 1969, p 591
- 29) W.Y. Ng, L.E.H. Trainor; Proceedings of the International  
Conference on Nuclear Physics, Vol. 1, Munich, 1973, p 160
- 30) I. Talmi, A. de-Shalit; Nuclear Shell Theory, Academic  
Press, New York and London, 4<sup>th</sup> printing, 1972
- 31) B.M. Preedom, B.H. Wildenthal; Phys. Rev. C6(1972)1633
- 32) R.Y. Cusson, H.C. Lee; Nucl. Phys. A211(1973)429

- 33) S.B. Khadkikar, D.R. Kulkarni; Phys. Rev. C10(1974)1189
- 34) A. Kelemen; entnommen aus einer bisher unveröffentlichten Arbeit über die Theorie der Projektionen.

Zu den Tabellen

Tab. 1 Zusammenfassung von Tab. 2 mit VAP - Ergebnissen zum Vergleich.

Tab. 2 gibt die Ergebnisse im Minimum an, die durch Einführung der verschiedenen Nebenbedingungen (a,b,c) entstanden sind. "Slater" gibt für jeden dieser Fälle die Entwicklungskoeffizienten im Minimum an. Anschließend sind unter Punkt 2d Vergleichswerte aus Ref. 8 entnommen worden, wobei die Größen  $\Delta E_{\text{VAP}}$  (Energien durch Variation nach Projektion) und  $\Delta E_{\text{VBP}}$  (Variation vor Projektion) hinzugefügt wurden.

Tab. 3 Ergebnisse für die reduzierten Übergangswahrscheinlichkeiten von Minimum zu Minimum und experimentelle und theoretische Vergleichswerte.

Vergleiche dazu auch Ref. 33

Tabelle 1

| J | VAP    | 8)    | VBP       |        |            |           |        |            |                         |        |            |  |
|---|--------|-------|-----------|--------|------------|-----------|--------|------------|-------------------------|--------|------------|--|
|   |        |       | $A_j J^2$ |        |            | $A_{Q20}$ |        |            | $A_j J^2$ und $A_{Q20}$ |        |            |  |
|   |        |       | $h^2 12$  | E      | $\Delta E$ | $h^2 12$  | E      | $\Delta E$ | $h^2 12$                | E      | $\Delta E$ |  |
| 0 | -41.11 | 0.00  | 3.89      | -41.07 | 0.00       | 3.36      | -41.01 | 0.00       | 3.25                    | -41.07 | 0.00       |  |
| 2 | -39.90 | 1.21  | 1.72      | -39.89 | 1.18       | 2.40      | -39.76 | 1.26       | 1.46                    | -39.90 | 1.17       |  |
| 4 | -37.36 | 3.75  | 1.71      | -37.35 | 3.72       | 3.32      | -37.05 | 3.96       | 1.71                    | -37.35 | 3.72       |  |
| 6 | -33.49 | 7.62  | 1.09      | -33.42 | 7.66       | (1.27     | -33.42 | 7.59)      | 0.80                    | -33.45 | 7.62       |  |
| 8 | -29.31 | 11.20 | -         | -      | -          | (1.44     | -29.67 | 11.35)     | -                       | -      | -          |  |

Tabelle 2

a)  $A_j J^2$  - Nebenbedingung (s. Fig. 1 bis 3)

$$EHF(0.) = -38.05 \text{ MeV}$$

$$h^2 12(.1) = 9.242 \text{ MeV}^2$$

| J | $A_j$ [MeV] | $h^2 12_{\text{proj.}}$ [MeV <sup>2</sup> ] | $E_p(A_j)$ [MeV] | $\Delta E_p$ [MeV] |
|---|-------------|---------------------------------------------|------------------|--------------------|
| 0 | .15         | 3.89                                        | -41.07           | 0.00               |
| 2 | .15         | 1.72                                        | -39.89           | 1.18               |
| 4 | .20         | 1.71                                        | -37.35           | 3.72               |
| 6 | .15         | 1.09                                        | -33.42           | 7.66               |

Slater ( $k=\frac{1}{2}$ )

| $A_j$ | $d_{\frac{5}{2}}$ | $s_{\frac{1}{2}}$ | $d_{\frac{3}{2}}$ |
|-------|-------------------|-------------------|-------------------|
| .15   | .747346           | -.424088          | -.511491          |
| .20   | .755511           | -.432969          | -.491671          |

b)  $A_q Q_{20}$  - Nebenbedingung (s. Fig. 4 bis 7)

$$EHF(0.) = -38.05 \text{ MeV}$$

$$h^2 12(1.) = 9.376 \text{ MeV}^2$$

| J | $A_q [\text{MeV}]$ | $h^2 12_{\text{proj.}} [\text{MeV}^2]$ | $E_p [\text{MeV}]$ | $\Delta E_p [\text{MeV}]$ |
|---|--------------------|----------------------------------------|--------------------|---------------------------|
| 0 | 4.0                | 3.364                                  | -41.013            | 0.00                      |
| 2 | 3.0                | 2.399                                  | -39.757            | 1.26                      |
| 4 | 1.0                | 3.317                                  | -37.049            | 3.96                      |
| 6 | (-2.0              | 1.273                                  | -33.419            | 7.59)                     |
| 8 | (-2.0              | 1.440                                  | -29.665            | 11.35)                    |

Slater ( $k = \frac{1}{2}$ )

| $A_q$ | $d_{\frac{5}{2}}$ | $s_{\frac{1}{2}}$ | $d_{\frac{3}{2}}$ |
|-------|-------------------|-------------------|-------------------|
| 4.0   | .698249           | -.421712          | -.578453          |
| 3.0   | .701745           | -.416109          | -.578280          |
| 1.0   | .709999           | -.402573          | -.577785          |
| (-2.0 | .727868           | -.373613          | -.574997)         |

c)  $A_j J^2$  und  $A_q Q_{20}$  - Nebenbedingung (s.Fig. 8 bis 14)

$$\text{EHF}(0.0,0.0) = -38.05 \text{ MeV}$$

$$h^2 12(.1,1.) = 9.230 \text{ MeV}^2$$

| J | $A_j$ [MeV] | $A_q$ [MeV] | $h^2 12_{\text{proj.}}$ [MeV <sup>2</sup> ] | $E_p$ [MeV] | $\Delta E_p$ [MeV] |
|---|-------------|-------------|---------------------------------------------|-------------|--------------------|
| 0 | .10         | 3.00        | 3.247                                       | -41.071     | 0.00               |
| 2 | .20         | 1.00        | 1.456                                       | -39.901     | 1.17               |
| 4 | .20         | 0.00        | 1.710                                       | -37.348     | 3.72               |
| 6 | .10         | -1.00       | .803                                        | -33.454     | 7.62               |

Slater ( $k = \frac{1}{2}$ )

| $A_j$ | $A_q$ | $d_{\frac{5}{2}}$ | $s_{\frac{1}{2}}$ | $d_{\frac{3}{2}}$ |
|-------|-------|-------------------|-------------------|-------------------|
| .1    | 3.0   | .712124           | -.427134          | -.557169          |
| .2    | 1.0   | .740077           | -.433118          | -.514485          |
| .2    | 0.0   | .755511           | -.432969          | -.491671          |
| .1    | -1.0  | .757477           | -.414176          | -.504664          |

d) Auszug aus Tab. I von Ref. 8

|                         | J=0    | J=2    | J=4    | J=6    | J=8               |
|-------------------------|--------|--------|--------|--------|-------------------|
| $x_{\frac{5}{2}}$       | .73    | .74    | .77    | .77    |                   |
| $x_{\frac{1}{2}}$       | -.52   | -.52   | -.47   | -.50   | $x_1/x_3 = -2.65$ |
| $x_{\frac{3}{2}}$       | -.44   | -.43   | -.44   | -.39   |                   |
| E (MeV)                 | -41.11 | -39.90 | -37.36 | -33.49 | -29.91            |
| E' (MeV)                | -40.95 | -39.73 | -37.05 | -33.37 | -29.54            |
| $\Delta E$              | -0.16  | -0.17  | -0.31  | -0.12  | -0.37             |
| $\Delta E_{\text{VAP}}$ | -      | 1.21   | 3.75   | 7.62   | 11.20             |
| $\Delta E_{\text{VBP}}$ | -      | 1.22   | 3.90   | 7.58   | 11.41             |

Tabelle 3

$B(E2; i \rightarrow f) [e^2 fm^4]$

| $J_i$ | $J_f$ | HF  | $A_j J^2$ | $A_q Q_{20}$ | $A_j J^2$ u. | $A_q Q_{20}$ | Theorie <sup>32)</sup> | Exp. <sup>32)</sup> |
|-------|-------|-----|-----------|--------------|--------------|--------------|------------------------|---------------------|
| 0     | 2     | 251 | 247       | 254          | 249          |              | 250                    | 287                 |
| 2     | 4     | 114 | 112       | 115          | 112          |              | 319                    | 353                 |
| 4     | 6     | 77  | 76        | 78           | 76           |              | 284                    | 322                 |
| 6     | 8     | 41  | 41        | 41           | 41           |              | 150                    | 121                 |

## Zu den Figuren

- Fig. 1 Hier ist die HF - Energie  $E_{HF}$  und das unprojizierte mittlere Schwankungsquadrat für die  $A_j J^2$  Nebenbedingung aufgetragen.
- Fig. 2 zeigt das mittlere projizierte Schwankungsquadrat in Abhängigkeit von  $A_j$ .
- Fig. 3 Hier werden die projizierten Energien in Abhängigkeit von  $A_j$  gezeichnet.
- Fig. 4 gibt die HF - Energien im Fall der Quadrupolbedingung wieder. Hier wurden zusätzlich zu der  $k=\frac{1}{2}$  Lösung die ebenfalls achsialsymmetrische  $k=\frac{5}{2}$  Lösung sowie eine nichtachsialsymmetrische Lösung eingezeichnet.
- Fig. 5 zeigt das unprojizierte mittlere Schwankungsquadrat in Abhängigkeit von  $A_q$ .
- Fig. 6 beschreibt denselben Sachverhalt wie Fig. 5 nach der Projektion auf guten Drehimpuls  $J$ .
- Fig. 7 Hier werden die projizierten Energien für die Quadrupolbedingung gezeigt.
- Fig. 8 Hier sehen wir die Ergebnisse der Zweiparameterrechnung  $A_j$  (0.0 bis 0.5) und  $A_q$  (-2.0 bis +5.0) für das unprojizierte mittlere Schwankungsquadrat.
- Fig. 9, Fig. 10, Fig. 11 und Fig. 12 zeigen die Resultate für das projizierte mittlere Schwankungsquadrat für die Parameterwerte von Fig. 8 für die  $J$  - Werte 0 (Fig. 9), 2 (Fig. 10), 4 (Fig. 11)

und 6 (Fig. 12)

Fig. 13 und Fig. 14

gibt den Kurvenverlauf der projizierten Energien  
wiederum für die Parameterwerte aus Fig. 8 und für  
die Drehimpulswerte  $J = 0, 2, 4, 6$  an.

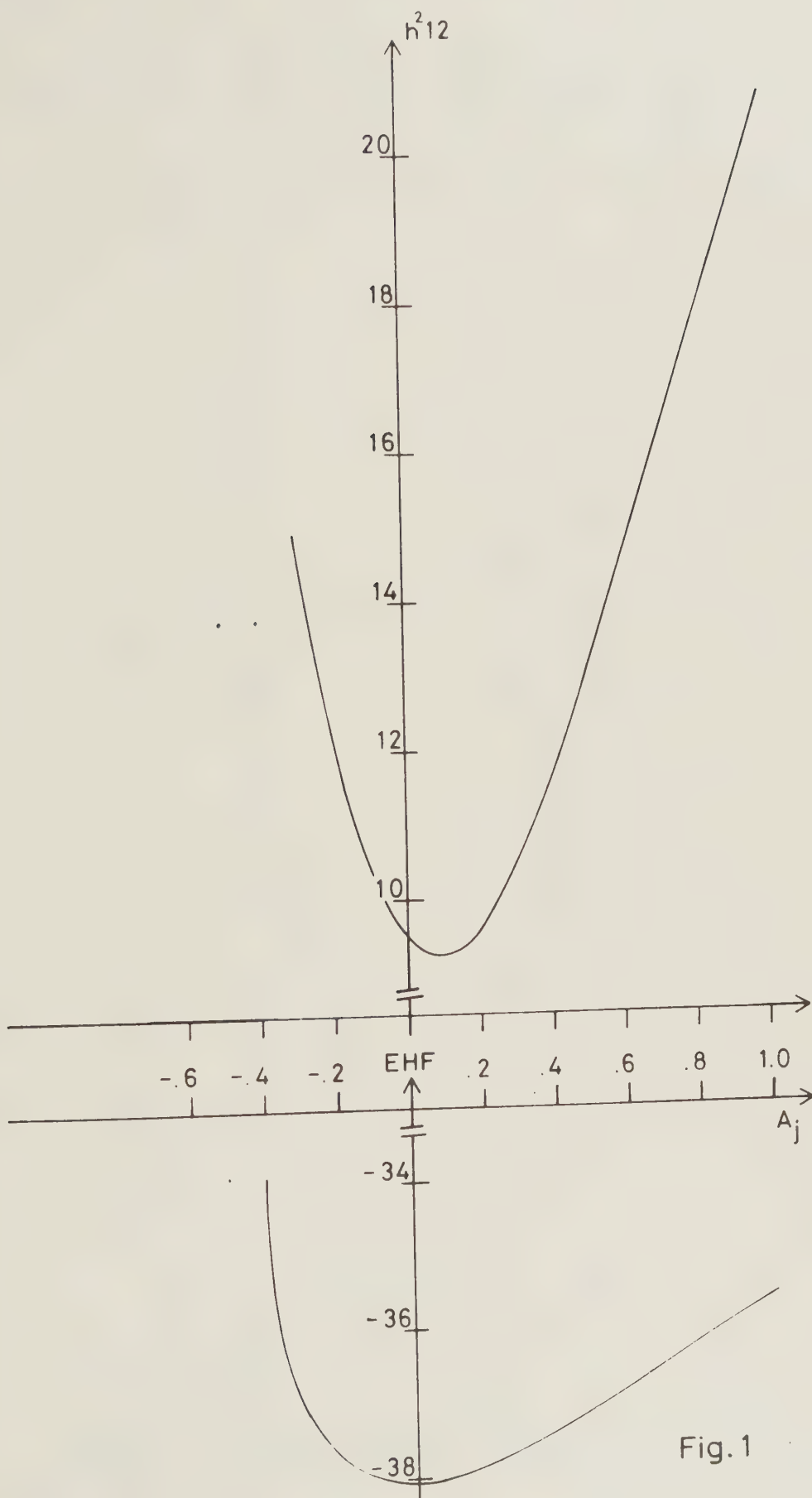
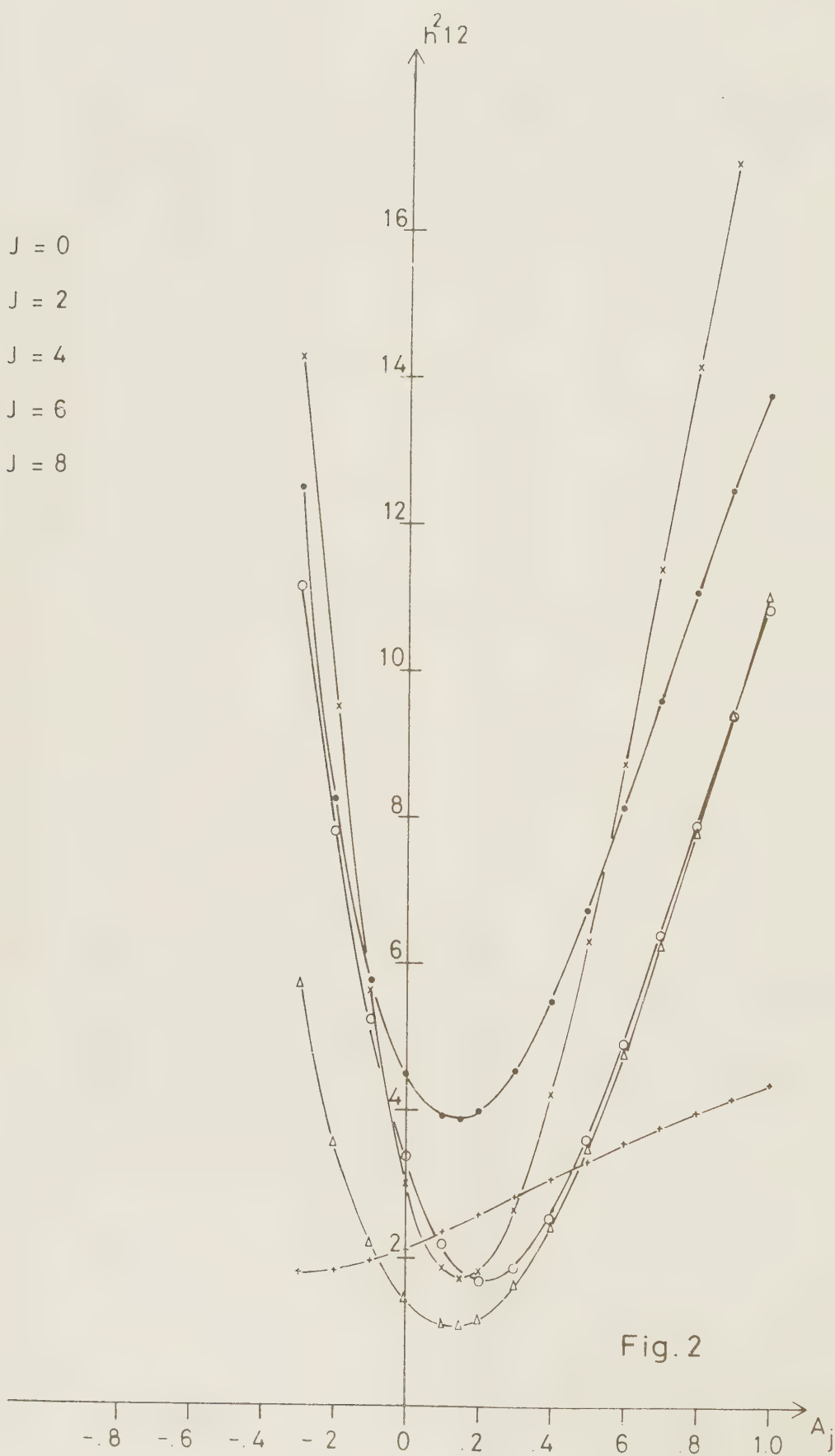


Fig. 1

- $J = 0$
- x  $J = 2$
- o  $J = 4$
- Δ  $J = 6$
- +  $J = 8$



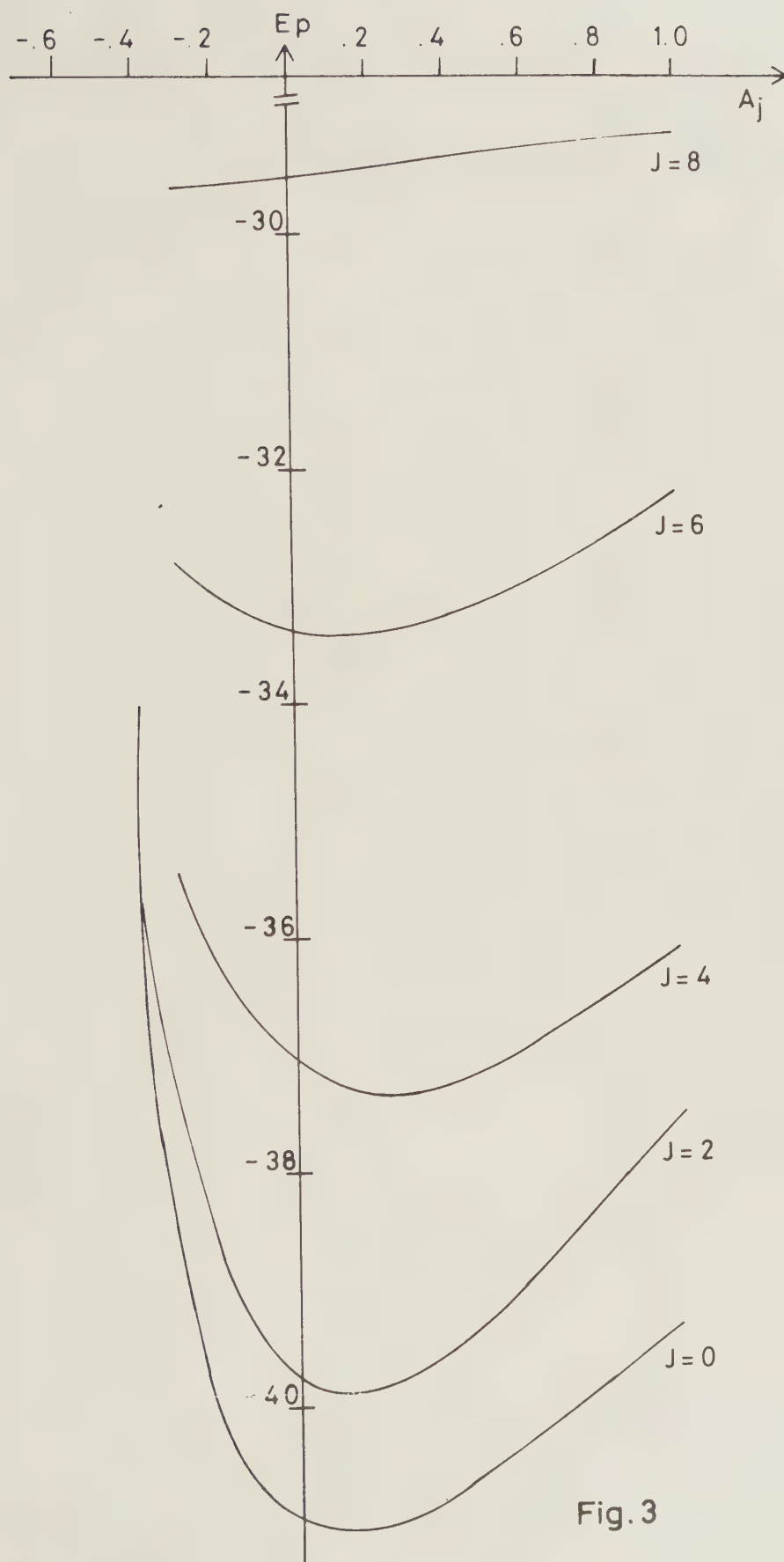


Fig. 3

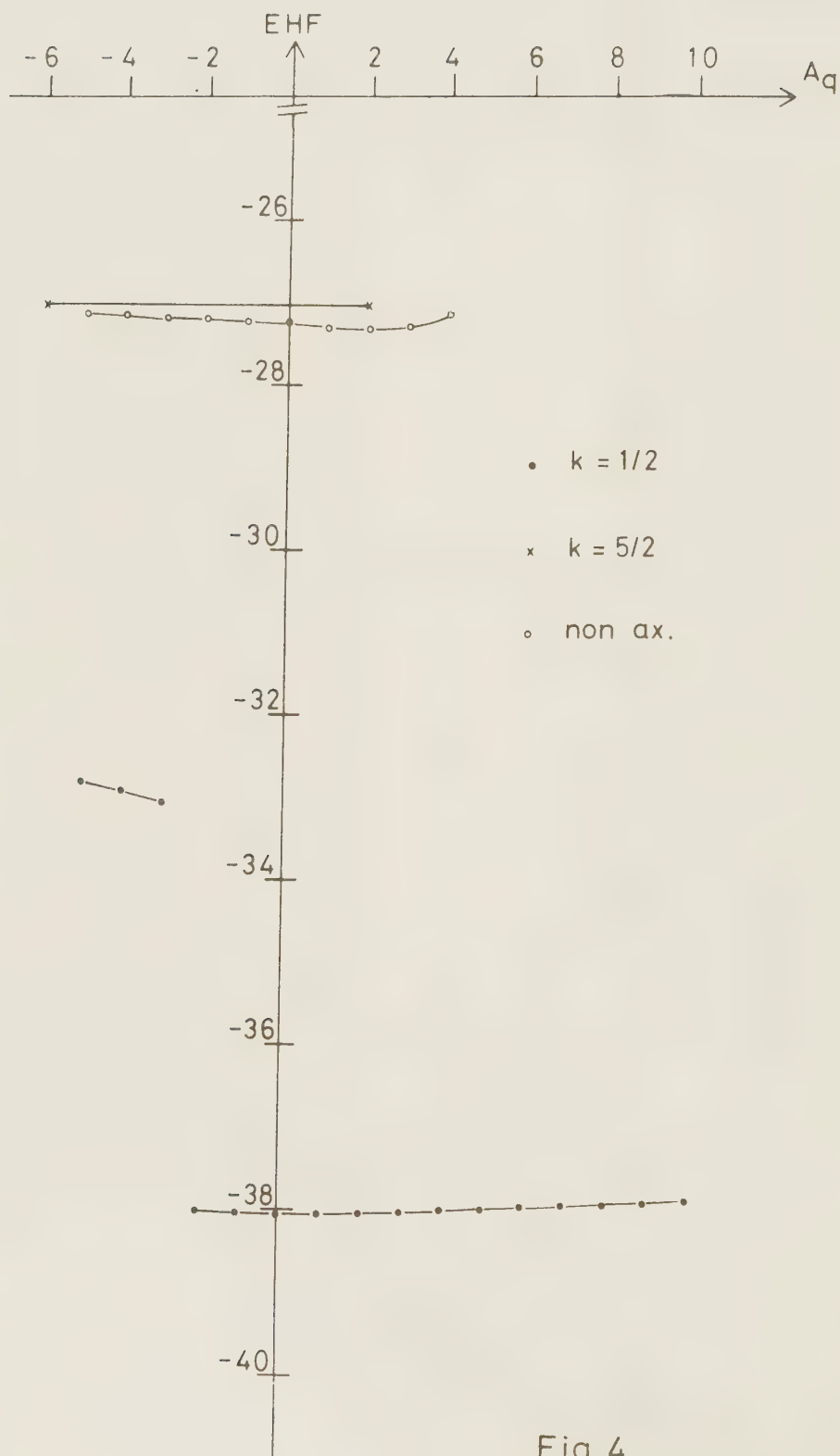


Fig.4



Fig.5

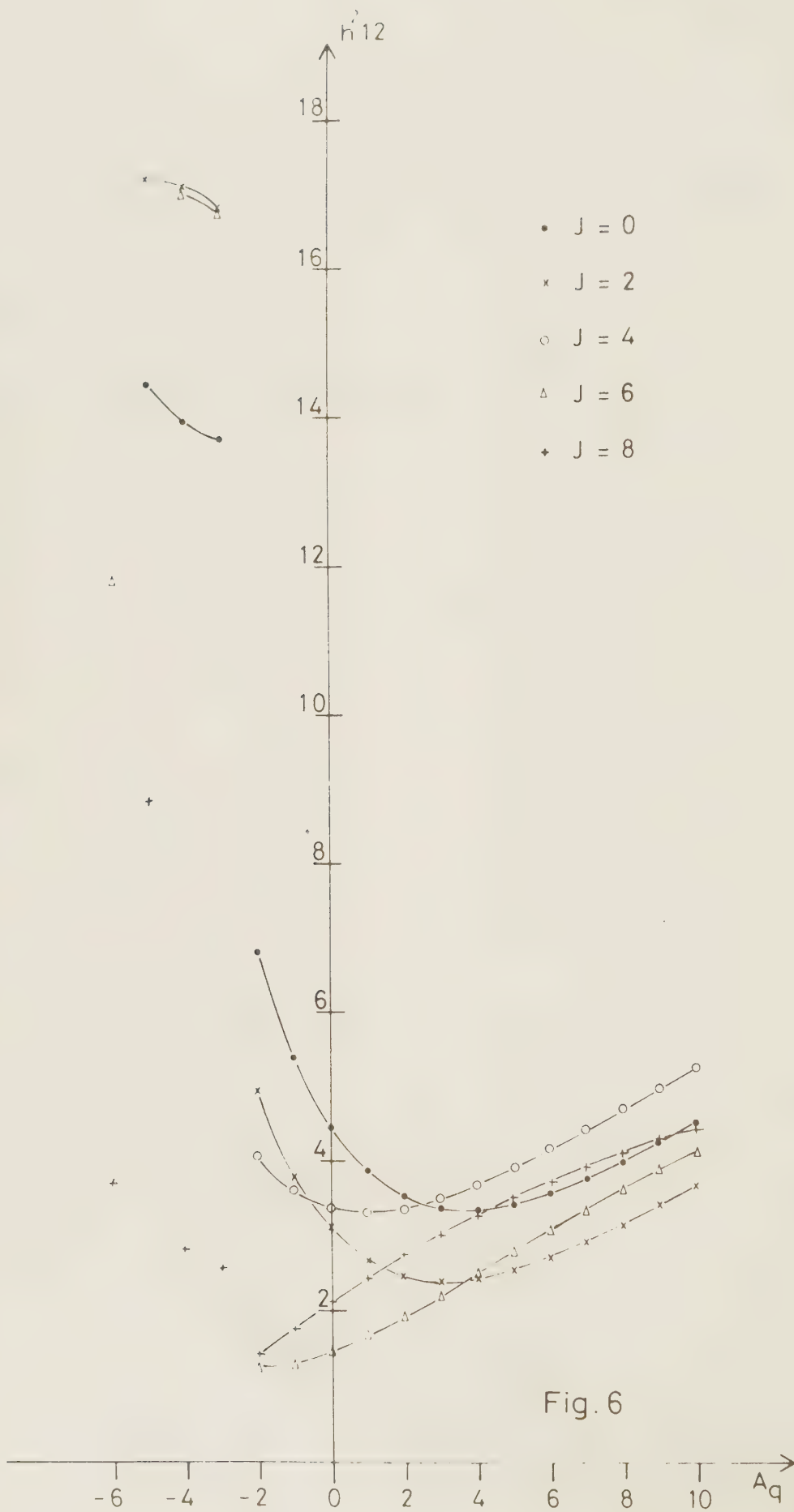


Fig. 6

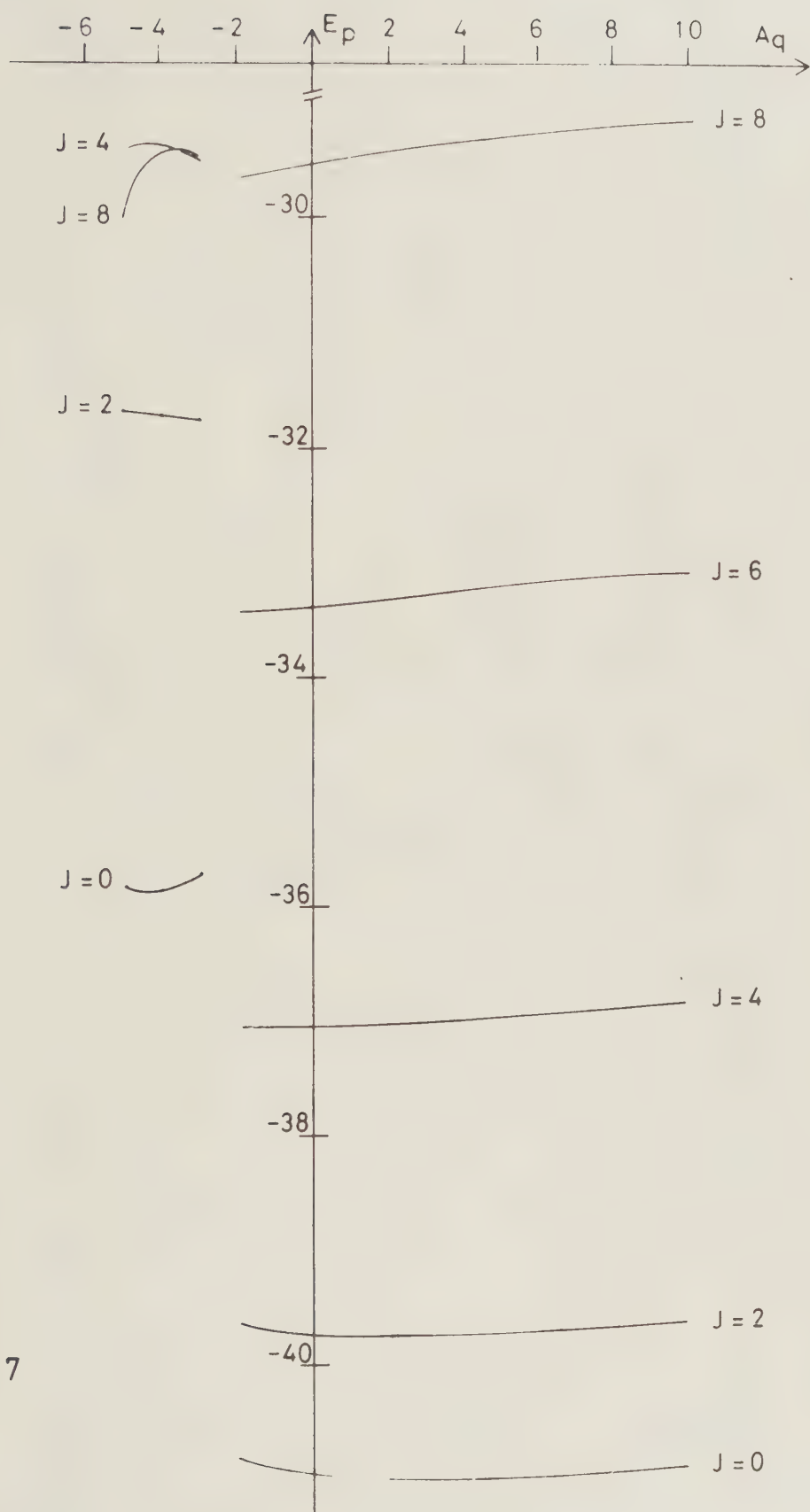


Fig. 7

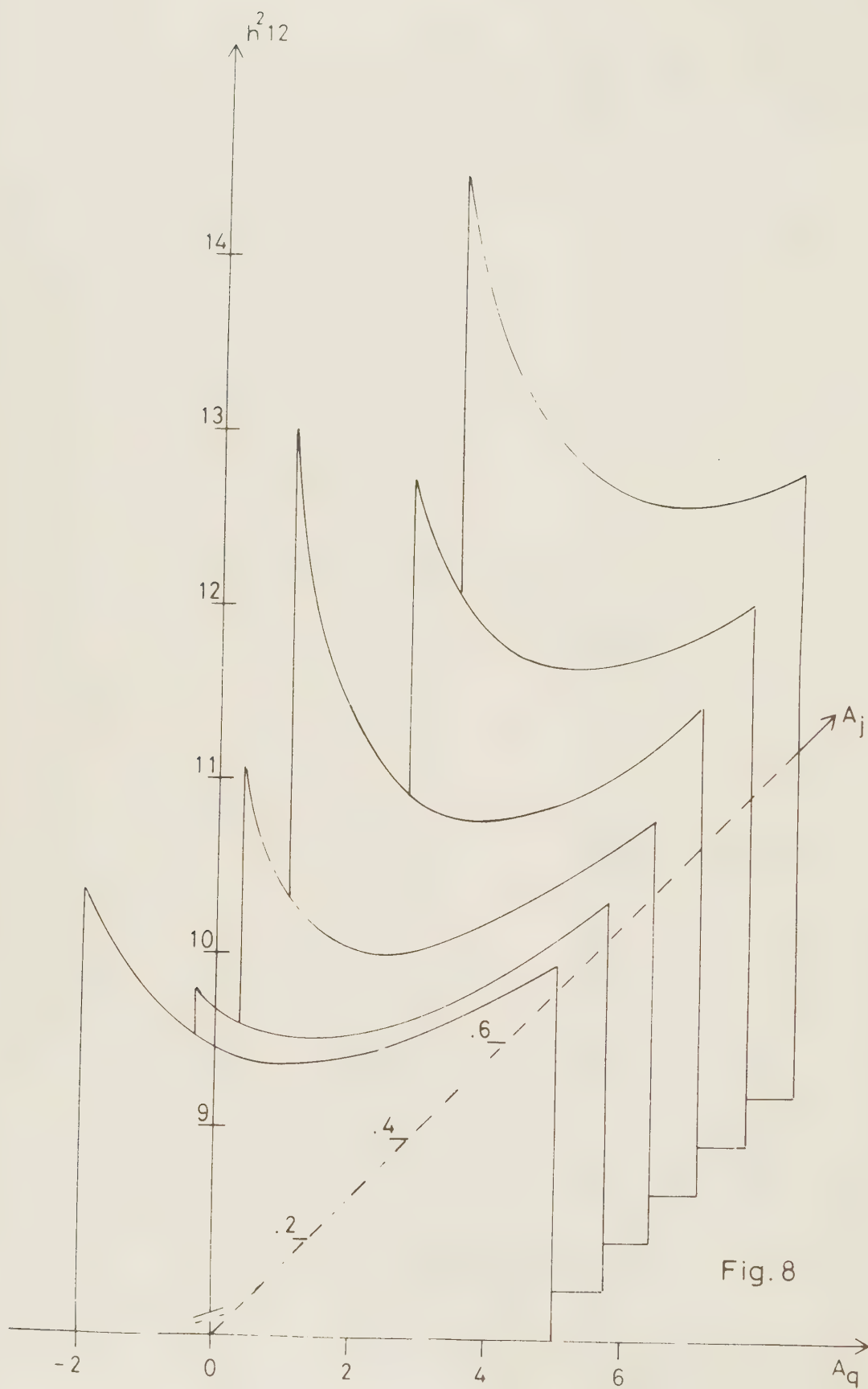


Fig. 8

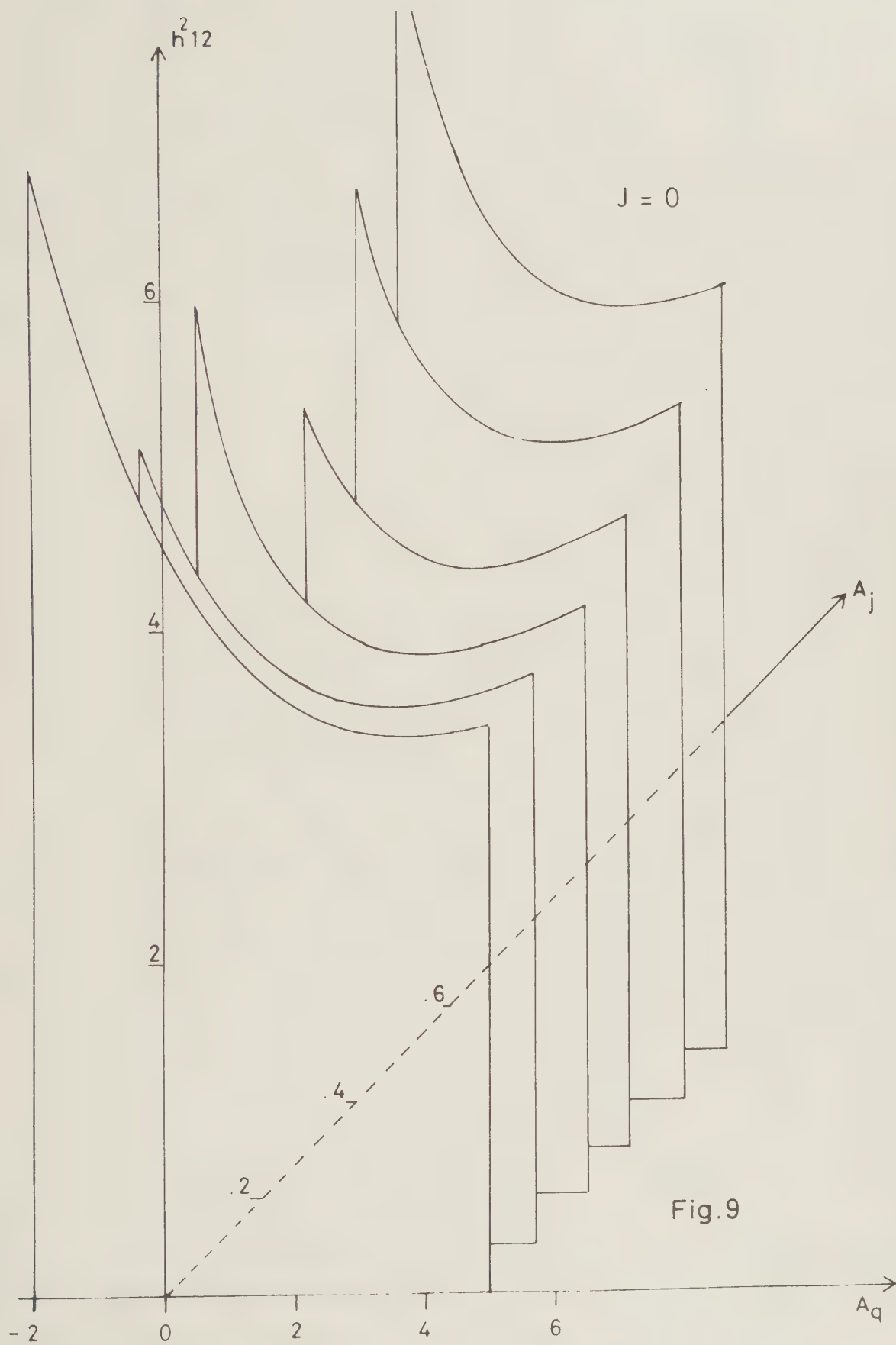


Fig.9

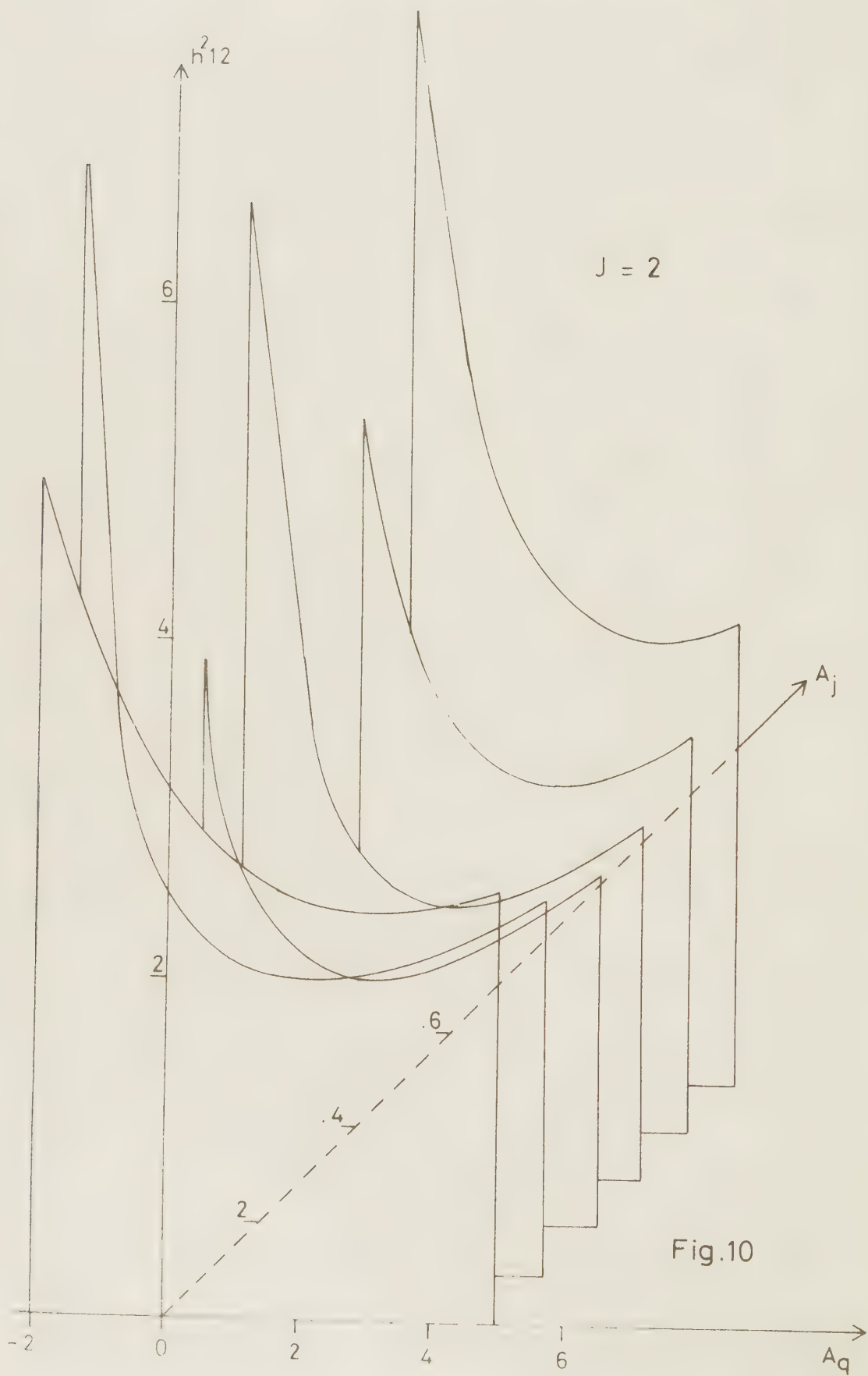
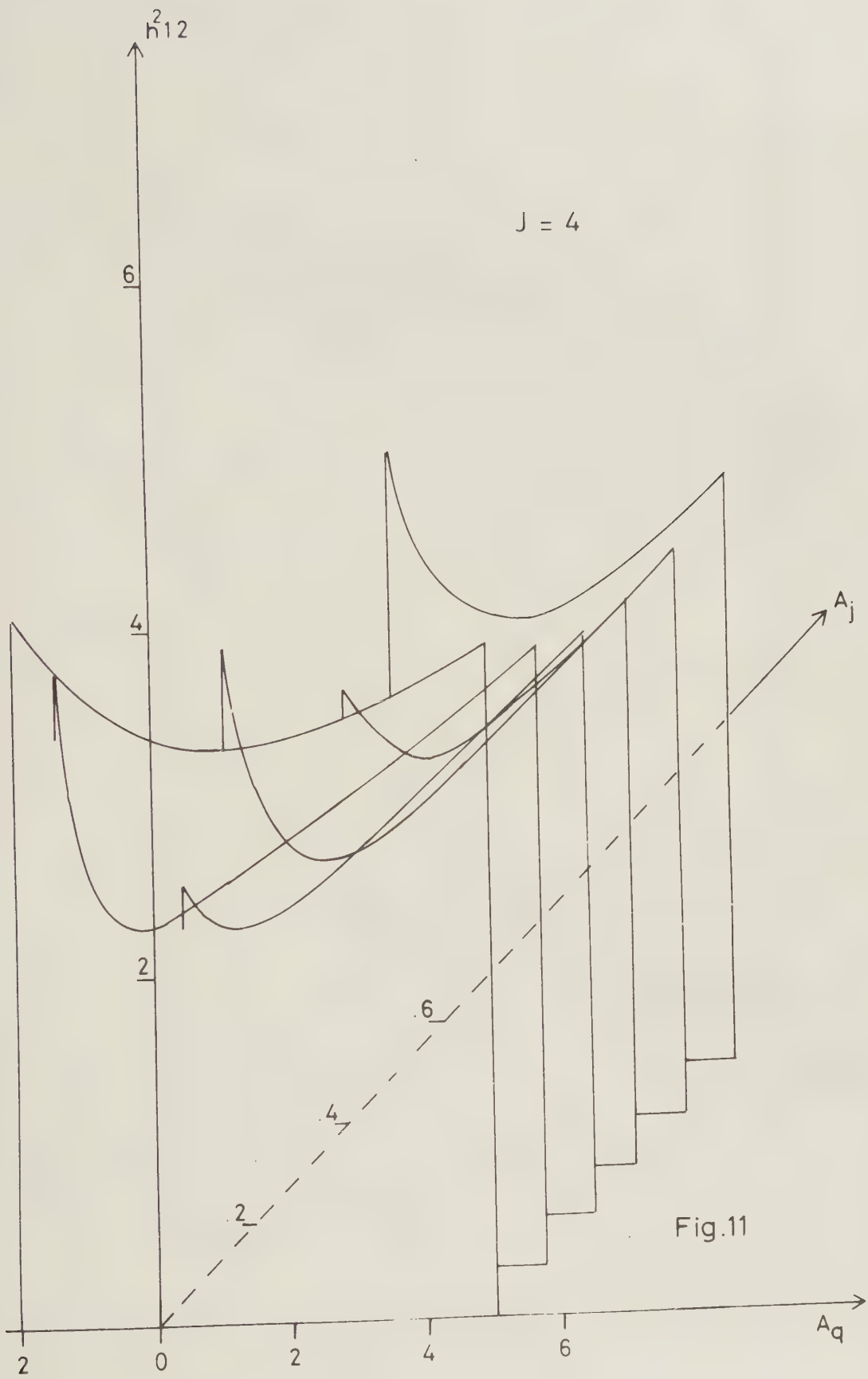


Fig.10



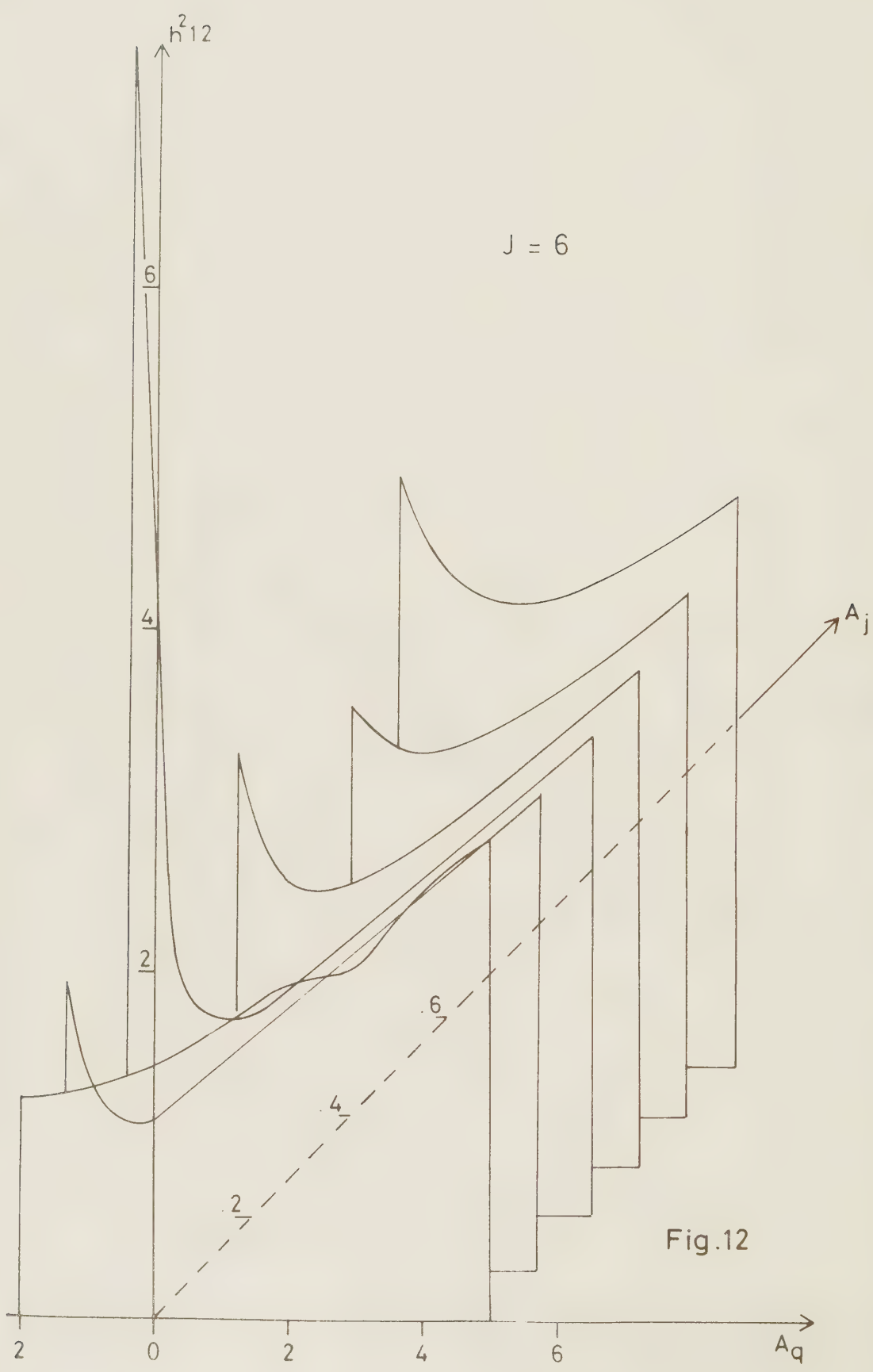


Fig.12

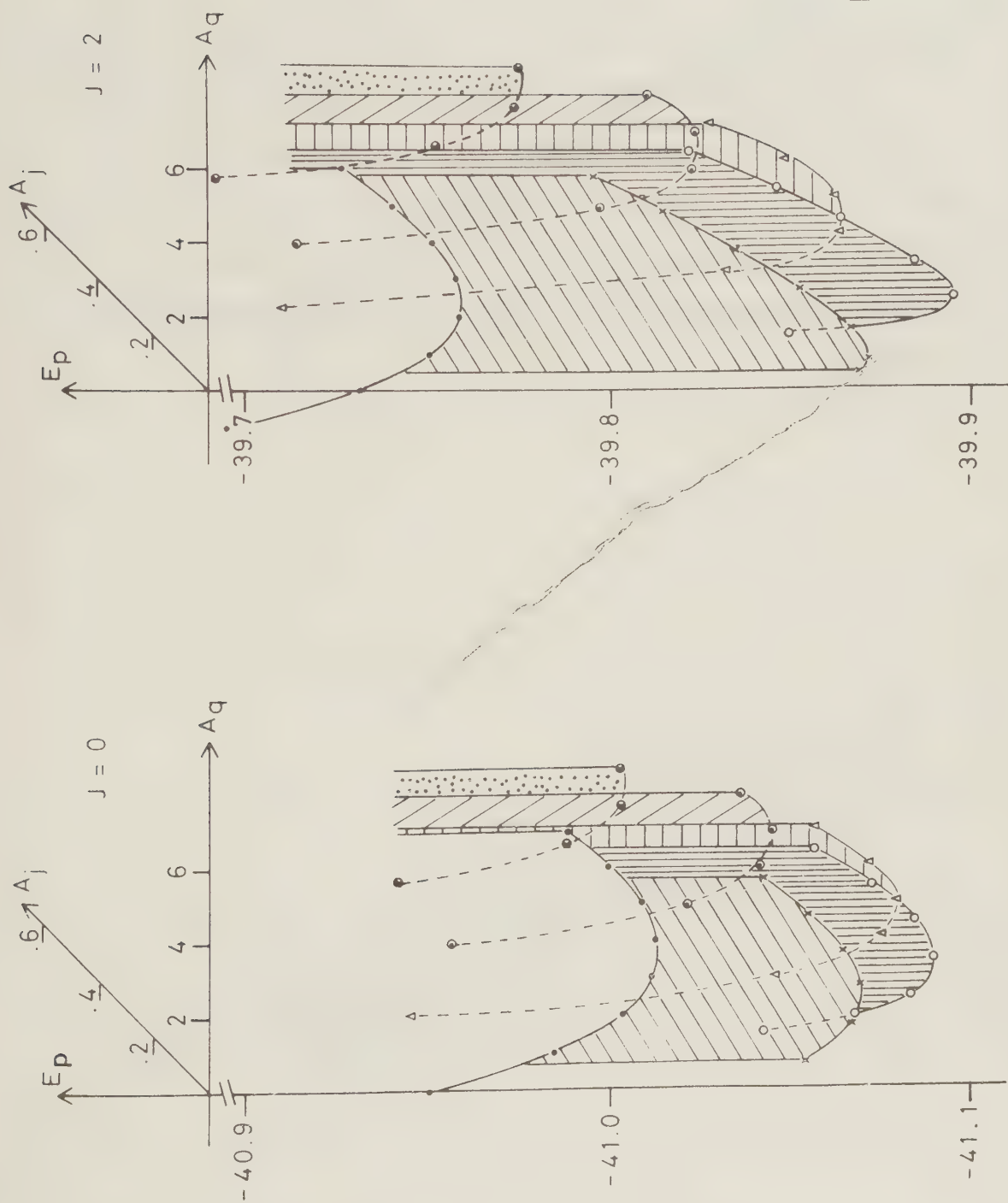


Fig.13

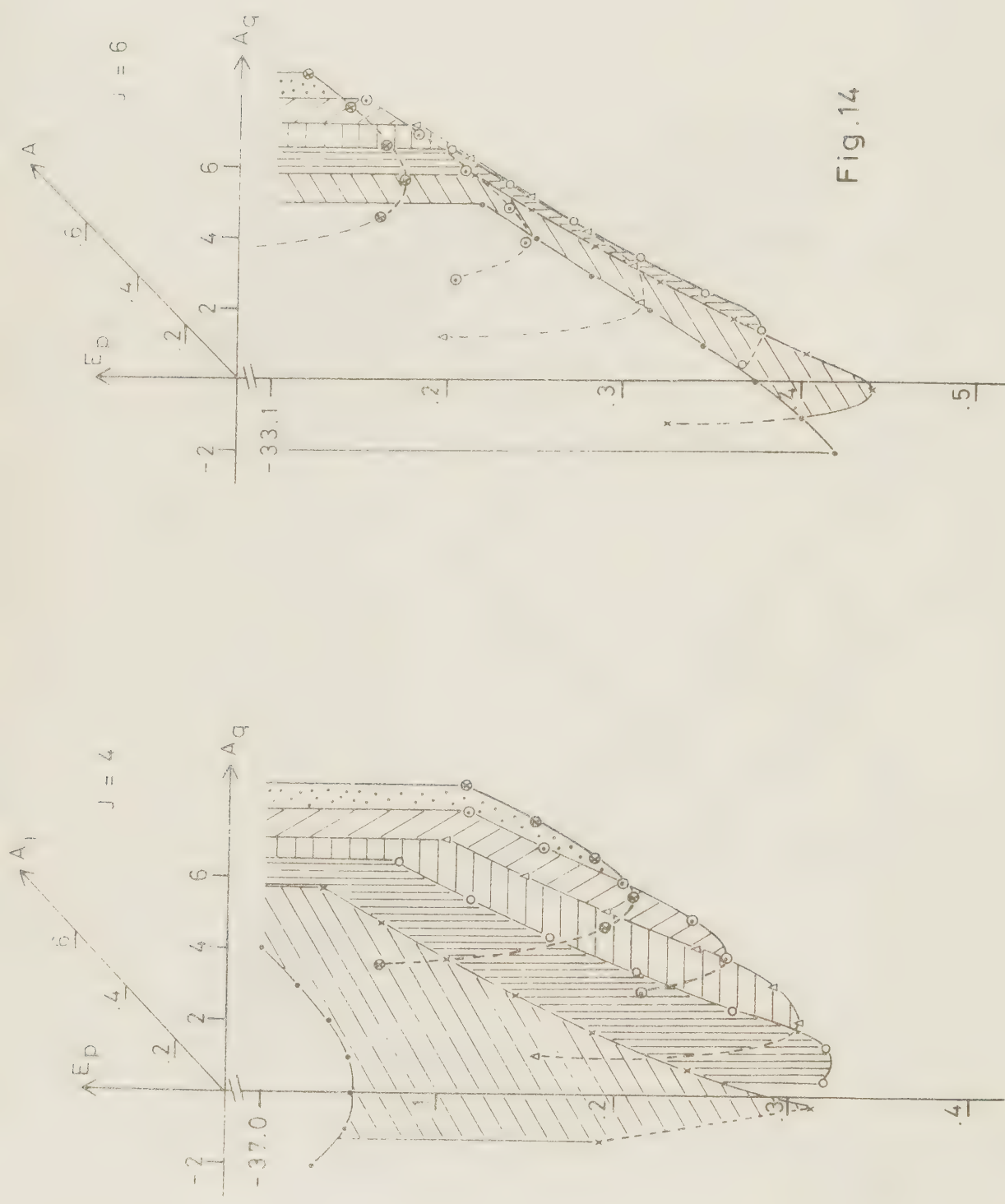


Fig.14

Herrn Prof. Dr. Reiner M. Dreizler möchte ich für die Anregung zu dieser Arbeit und für das besondere Interesse, das er ihr entgegenbrachte, sehr herzlich danken.

Herrn Dr. H. Miller und insbesondere Herrn Dr. A. Kelemen danke ich für ihre fortwährende Diskussionsbereitschaft und Unterstützung bei der Durchführung der Arbeit.

Mein Dank gilt an dieser Stelle auch den Herren Operateuren des Hochschulrechenzentrums der Universität Frankfurt, die durch ihre Arbeit an den Wochenenden zu einer zügigen Durchführung der umfangreichen Rechnungen beigetragen haben.

# Appendix <sup>34)</sup>

Um die Matrixelemente  $\langle \phi_\alpha | O | \phi_\beta \rangle$  zu berechnen, bedienen wir uns der Formelsprache der Mengenlehre.

Wir setzen

$$P = (i_1, \dots, i_n) \text{ und } R = (j_1, \dots, j_n)$$

dann ist

$$(P|R) = \prod_{\alpha=1}^n \phi_{i_\alpha}(x_{j_\alpha}) \quad (A.1)$$

Zwischen den Mengen P und R gelten die üblichen Operationen Vereinigung ( $\cup$ ), Durchschnitt ( $\cap$ ) und Disjunktion ( $\setminus$ ).

Weiterhin ist  $\text{Dim}(P) = n$ ,  $\{P\}$  bezeichnet die geordnete Permutation von P und  $PR = (i_1, \dots, i_n, j_1, \dots, j_n)$ . Eine

normierte Determinante  $|\phi\rangle$  kann somit geschrieben werden als

$$|\phi(N)\rangle = \frac{1}{\sqrt{\text{Dim}(M)!}} \sum_{\substack{B \in \mathcal{P}(M) \\ M=\{M\}}} \text{sign}(B)(B|N) = \frac{1}{\sqrt{\text{Dim}(M)!}} D(M|N) \quad (A.2)$$

wobei  $\mathcal{P}(M)$  die Menge aller Permutationen von M ist,  $\text{sign}(B)$  das Vorzeichen von B angibt und D die nichtnormierte Determinante darstellt. N bezeichnet die Menge der Indices der Koordinaten  $(x_1, \dots, x_n)$ . Setzen wir

$$O = \sum'_{I \subseteq N} O(I) \quad (A.3)$$

wobei der Strich anzeigt, daß I die Bedingung  $I = \{I\}$  erfüllt mit  $\text{Dim}(I) = k$ , erhalten wir

$$\begin{aligned} \langle \phi_\alpha | O | \phi_\beta \rangle &= \frac{1}{\text{Dim}(N)!} \int D^*(M_L|N) \sum'_{I \subseteq N} O(I) D(M_R|N) d(N) \\ &= \frac{1}{k!(\text{Dim}(N)-k)!} \int D^*(M_L|N) O(K) D(M_R|N) d(N) \quad (A.4) \end{aligned}$$

wobei  $K = (1, \dots, k)$  und  $M_L, M_R$  und N geordnete Mengen sind.

Dabei ist

$$\begin{aligned}
 D(M_L | N) &= \sum'_{M_1 \subseteq M_L} \text{sign}(M_1(M_L \setminus M_1)) \sum_{A_1 \in \mathcal{P}(M_1)} \text{sign}(A_1)(A_1 | K) \\
 &\quad \cdot \sum_{A_2 \in \mathcal{P}(M_L \setminus M_1)} \text{sign}(A_2)(A_2 | N \setminus K) \\
 &= \sum'_{M_1 \subseteq M_L} \text{sign}(M_1(M_L \setminus M_1)) D(M_1 | K) D(M_L \setminus M_1 | N \setminus K) \quad (A.5)
 \end{aligned}$$

Hierbei haben wir die Relation

$$\text{sign}(P) = \text{sign}(P_1 P_2) = \text{sign}(P_1) \text{sign}(P_2) \text{sign}(\{P_1\} \{P_2\}) \quad (A.6)$$

verwendet. Setzen wir Gl.(A.5) in Gl.(A.4) ein, ergibt sich

$$\begin{aligned}
 \langle \Phi_\alpha | O | \Phi_\beta \rangle &= \frac{1}{k!} \sum'_{M_1 \subseteq M_L} \sum'_{M_2 \subseteq M_R} \text{sign}(M_1(M_L \setminus M_1)) \text{sign}(M_2(M_R \setminus M_2)) \\
 &\quad \cdot \int D^*(M_1 | K) O(K) D(M_2 | K) d(K) \delta_{M_L \setminus M_1, M_R \setminus M_2} \quad (A.7)
 \end{aligned}$$

wobei

$$\begin{aligned}
 \int D^*(M_L \setminus M_1 | N \setminus K) D(M_R \setminus M_2 | N \setminus K) d(N \setminus K) &= \delta_{M_L \setminus M_1, M_R \setminus M_2} \\
 &\quad \cdot (\text{Dim}(M_L) - k)! \quad (A.8)
 \end{aligned}$$

Die Kronecker Delta Symbole in Gl.(A.7) und (A.8) zeigen, daß nur der Fall

$$M_L \setminus M_1 = M_R \setminus M_2 \quad (A.9)$$

betrachtet werden muß. Die letzte Relation kann als eine Gleichung angesehen werden, die für  $M_1$  und  $M_2$  gelöst werden muß. Die allgemeine Lösung lautet

$$M_1 = (M_L \setminus M_L \cap M_R) \cup Q \quad (A.10a)$$

$$M_2 = (M_R \setminus M_L \cap M_R) \cup Q \quad (A.10b)$$

wobei

$$Q \subseteq M_L \cap M_R, \quad Q = \{Q\} \quad (A.11)$$

und

$$\text{Dim}(Q) = k - \text{Dim}(M_L) + \text{Dim}(M_L \cap M_R) \quad (\text{A.12})$$

In den folgenden Relationen bedeutet der Doppelstrich, daß  $Q$  die Bedingungen (A.11) und (A.12) erfüllen muß. Infolgedessen erhalten wir für (A.7)

$$\begin{aligned} \langle \phi_\alpha | 0 | \phi_\beta \rangle &= \frac{1}{k!} \sum_Q \text{sign} [ ((M_L \setminus M_L \cap M_R) \cup Q) (M_L \cap M_R \setminus Q) ] \\ &\quad \cdot \text{sign} [ ((M_R \setminus M_L \cap M_R) \cup Q) (M_L \cap M_R \setminus Q) ] \quad (\text{A.13}) \\ &\quad \cdot \int D^* ((M_L \setminus M_L \cap M_R) \cup Q | K) O(K) D((M_R \setminus M_L \cap M_R) \cup Q | K) d(K) \end{aligned}$$

oder wenn man vollständig antisymmetrisierte Matrixelemente

$\langle \{ | \} \rangle$  einführt

$$\begin{aligned} \langle \phi_\alpha | 0 | \phi_\beta \rangle &= \sum_Q \text{sign} [ ((M_L \setminus M_L \cap M_R) \cup Q) (M_L \cap M_R \setminus Q) ] \\ &\quad \cdot \text{sign} [ ((M_R \setminus M_L \cap M_R) \cup Q) (M_L \cap M_R \setminus Q) ] \quad (\text{A.14}) \\ &\quad \cdot \langle \{ (M_L \setminus M_L \cap M_R) \cup Q | 0 | (M_R \setminus M_L \cap M_R) \cup Q \} \rangle. \end{aligned}$$

Wir sehen auch, daß

$$0 \leq \text{Dim}(M_L) - k \leq \text{Dim}(M_L \cap M_R) \leq \text{Dim}(M_L) \quad (\text{A.15})$$

was der Tatsache entspricht, daß ein  $k$ -Teilchen Operator, wenn er auf eine Determinante wirkt, höchstens eine  $k$ -Teilchen  $k$ -Loch Anregung der Determinante bewirken kann.

Wenden wir uns nun der praktischen Anwendung von Gl. (A.14) in Bezug auf Ein- und Zweiteilchenoperatoren zu. Sei  $k=1$ , dann liegt wegen (A.10) entweder

$$M_L = M_R$$

oder

$$\begin{aligned} \xi &= M_L \setminus M_L \cap M_R \\ \sigma &= M_R \setminus M_L \cap M_R \\ Q &= 0 \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

vor, so daß

$$\text{sign}[((M_L \setminus M_L \cap M_R) \cup Q)(M_L \cap M_R \setminus Q)] = (-)^{\xi [M_L] + 1} \quad (\text{A.17})$$

wobei  $\xi [M_L]$  die Position von  $\xi$  in  $M_L$  angibt.

Für  $k = 2$  erhalten wir

$$M_L = M_R$$

oder

$$\begin{aligned} \xi &= M_L \setminus M_L \cap M_R \\ \sigma &= M_R \setminus M_L \cap M_R \\ \eta &= Q \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

und

$$\text{sign}[((M_L \setminus M_L \cap M_R) \cup Q)(M_L \cap M_R \setminus Q)] = (-)^{\xi [M_L] + \eta [M_L] + 1} S[\xi \eta] \quad (\text{A.19})$$

wobei

$$S[\xi \eta] = \begin{cases} 1 & \xi < \eta \\ -1 & \xi > \eta \end{cases} \quad (\text{A.20})$$

oder

$$\begin{aligned} \xi < \zeta : (\xi, \zeta) &= M_L \setminus M_L \cap M_R \\ \sigma < \tau : (\sigma, \tau) &= M_R \setminus M_L \cap M_R \\ Q &= 0 \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

und

$$\text{sign}[((M_L \setminus M_L \cap M_R) \cup Q)(M_L \cap M_R \setminus Q)] = (-)^{\xi [M_L] + \zeta [M_L] + 1} \quad (\text{A.22})$$

Die Anwendung dieser Formel liefert für

1.)  $k = 1$

$$\text{a) } M_L = M_R$$

$$\langle \phi_\alpha | 0 | \phi_\beta \rangle = \sum_{\eta \in M_L} \langle \phi_\eta | 0 | \phi_\eta \rangle \quad (\text{A.23})$$

$$\text{b) } M_R = (M_L \setminus \xi) \cup \sigma, \quad \sigma \notin M_L$$

$$\langle \phi_\alpha | 0 | \phi_\beta \rangle = (-)^{\xi [M_L] + \sigma [M_R]} \langle \phi_\xi | 0 | \phi_\sigma \rangle \quad (\text{A.24})$$

2.)  $k = 2$

a)  $M_L = M_R$

$$\langle \phi_\alpha | 0 | \phi_\beta \rangle = \sum_{\substack{\eta, \theta \in M_L \\ \eta < \theta}} \langle \{ \phi_\eta \phi_\theta | 0 | \phi_\eta \phi_\theta \} \rangle \quad (A.25)$$

b)  $M_R = (M_L \setminus \xi) \cup \sigma$ ,  $\sigma \notin M_L$

$$\begin{aligned} \langle \phi_\alpha | 0 | \phi_\beta \rangle &= \sum_{\substack{\eta \in M_L \\ \eta \neq \xi}} (-)^{\xi [M_L] + \sigma [M_R] + \eta [M_L] + \eta [M_R]} S[\xi \eta] \\ &\cdot S[\sigma \eta] \langle \{ \phi_\xi \phi_\eta | 0 | \phi_\sigma \phi_\eta \} \rangle \end{aligned} \quad (A.26)$$

c)  $M_R = (M_L \setminus (\xi, \zeta)) \cup (\sigma, \tau)$ ;  $\xi < \zeta$ ;  $\sigma < \tau$  und  $\sigma, \tau \notin M_L$

$$\begin{aligned} \langle \phi_\alpha | 0 | \phi_\beta \rangle &= (-)^{\xi [M_L] + \zeta [M_L] + \sigma [M_R] + \tau [M_R]} \\ &\cdot \langle \{ \phi_\xi \phi_\zeta | 0 | \phi_\sigma \phi_\tau \} \rangle \end{aligned} \quad (A.27)$$

Müssen wir zwei Arten von Teilchen berücksichtigen, z.B.

Protonen und Neutronen, und der Operator unterscheidet nicht zwischen ihnen, erhalten wir ( $M$  bzw.  $N$  stehen für Protonen- bzw. Neutronenindices)

1.)  $k = 1$

a)  $M_L = M_R$ ,  $N_L = N_R$

$$\langle \phi_\alpha | 0 | \phi_\beta \rangle = \sum_{\eta \in M_L} \langle \phi_\eta | 0 | \phi_\eta \rangle + \sum_{\eta \in N_L} \langle \phi_\eta | 0 | \phi_\eta \rangle \quad (A.28)$$

b)  $M_R = (M_L \setminus \xi) \cup \sigma$ ,  $\sigma \notin M_L$ ,  $N_R = N_L$

$$\langle \phi_\alpha | 0 | \phi_\beta \rangle = (-)^{\xi [M_L] + \sigma [M_R]} \langle \phi_\xi | 0 | \phi_\sigma \rangle \quad (A.29)$$

c)  $M_R = M_L$ ,  $N_R = (N_L \setminus \xi) \cup \sigma$ ,  $\sigma \notin N_L$

$$\langle \phi_\alpha | 0 | \phi_\beta \rangle = (-)^{\xi [N_L] + \sigma [N_R]} \langle \phi_\xi | 0 | \phi_\sigma \rangle \quad (A.30)$$

2.)  $k = 2$

a)  $M_L = M_R$  ,  $N_L = N_R$

$$\begin{aligned} \langle \phi_\alpha | 0 | \phi_\beta \rangle &= \sum_{\substack{\eta, \theta \in M_L \\ \eta < \theta}} \langle \{ \phi_\eta \phi_\theta | 0 | \phi_\eta \phi_\theta \} \rangle + \sum_{\substack{\eta, \theta \in N_L \\ \eta < \theta}} \langle \{ \phi_\eta \phi_\theta | 0 | \phi_\eta \phi_\theta \} \rangle \\ &+ \sum_{\substack{\eta \in M_L \\ \theta \in N_L}} \langle (\phi_\eta \phi_\theta | 0 | \phi_\eta \phi_\theta) \rangle \end{aligned} \quad (A.31)$$

b)  $M_R = (M_L \setminus \xi) \cup \sigma$  ,  $\sigma \notin M_L$  ,  $N_R = N_L$

$$\begin{aligned} \langle \phi_\alpha | 0 | \phi_\beta \rangle &= \sum_{\substack{\eta \in M_L \\ \eta \neq \xi}} (-)^{\xi[M_L] + \sigma[M_R] + \eta[M_L] + \eta[M_R]} S[\xi \eta] \\ &\cdot S[\sigma \eta] \langle \{ \phi_\xi \phi_\eta | 0 | \phi_\sigma \phi_\eta \} \rangle \\ &+ \sum_{\eta \in N_L} (-)^{\xi[M_L] + \sigma[M_R]} \langle (\phi_\xi \phi_\eta | 0 | \phi_\sigma \phi_\eta) \rangle \end{aligned} \quad (A.32)$$

c)  $M_R = M_L$  ,  $N_R = (N_L \setminus \xi) \cup \sigma$  ,  $\sigma \notin N_L$

$$\begin{aligned} \langle \phi_\alpha | 0 | \phi_\beta \rangle &= \sum_{\substack{\eta \in N_L \\ \eta \neq \xi}} (-)^{\xi[N_L] + \sigma[N_R] + \eta[N_L] + \eta[N_R]} S[\xi \eta] \\ &\cdot S[\sigma \eta] \langle \{ \phi_\xi \phi_\eta | 0 | \phi_\sigma \phi_\eta \} \rangle \\ &+ \sum_{\eta \in M_L} (-)^{\xi[N_L] + \sigma[N_R]} \langle (\phi_\xi \phi_\eta | 0 | \phi_\sigma \phi_\eta) \rangle \end{aligned} \quad (A.33)$$

d)  $M_R = (M_L \setminus \xi) \cup \sigma$  ,  $\sigma \notin M_L$  ;  $N_R = (N_L \setminus \zeta) \cup \tau$  ,  $\tau \notin N_L$

$$\begin{aligned} \langle \phi_\alpha | 0 | \phi_\beta \rangle &= (-)^{\xi[M_L] + \zeta[N_L] + \sigma[M_R] + \tau[N_R]} \\ &\cdot \langle (\phi_\xi \phi_\zeta | 0 | \phi_\sigma \phi_\tau) \rangle \end{aligned} \quad (A.34)$$

$$e) M_R = (M_L \setminus (\xi, \zeta)) \cup (\sigma, \tau); \xi < \zeta; \sigma < \tau \text{ und } \sigma, \tau \notin M_L; N_R = N_L$$

$$\langle \phi_\alpha | 0 | \phi_\beta \rangle = (-)^{\xi [M_L] + \zeta [M_L] + \sigma [M_R] + \tau [M_R]}$$

$$\cdot \langle \{ \phi_\xi \phi_\zeta | 0 | \phi_\sigma \phi_\tau \} \rangle \quad (A.35)$$

$$f) M_R = M_L; N_R = (N_L \setminus (\xi, \zeta)) \cup (\sigma, \tau); \xi < \zeta; \sigma < \tau \text{ und } \sigma, \tau \notin N_L$$

$$\langle \phi_\alpha | 0 | \phi_\beta \rangle = (-)^{\xi [N_L] + \zeta [N_L] + \sigma [N_R] + \tau [N_R]}$$

$$\cdot \langle \{ \phi_\xi \phi_\zeta | 0 | \phi_\sigma \phi_\tau \} \rangle \quad (A.36)$$

wobei  $\langle (1 \ 1) \rangle$  für das direkte Matrixelement steht.

## Tabellarischer Lebenslauf

|                |                                                                                                                                                    |
|----------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 15. Dez. 1949  | Geburt in Ostberlin                                                                                                                                |
| Jan. 1953      | Flucht in die Bundesrepublik                                                                                                                       |
| 1953 - 1954    | Wohnsitz in Duisburg                                                                                                                               |
| 1954           | Umzug nach Hamburg                                                                                                                                 |
| 1956           | Umzug nach Frankfurt                                                                                                                               |
| 1956 - 1960    | Besuch der Grundschule                                                                                                                             |
| 1960 - 1968    | Besuch des Gymnasiums mit Abschluß Abitur                                                                                                          |
| 9. Okt. 1968   | Immatrikulation für das Physikstudium an<br>der Johann Wolfgang Goethe-Universität<br>in Frankfurt                                                 |
| 9. Juli 1970   | Diplom-Vorprüfung im Fach Physik                                                                                                                   |
| 1971 - 1972    | Diplomarbeit am Institut für Kernphysik<br>in Frankfurt                                                                                            |
| 24. April 1972 | Diplom-Hauptprüfung im Fach Physik                                                                                                                 |
| Mai 1972       | Beginn der Doktorarbeit am Institut für<br>Theoretische Physik in Frankfurt. Voraus-<br>sichtlicher Abschluß der Arbeit am Ende<br>des WS 1974/75. |

Meine akademischen Lehrer waren die Herren Professoren Greiner, Martienssen, Dänzer, Köthe, Schwarz, Stummel, Bundke, Doiwa, Lohmann, Schopper, Stelzer, Mauck, Bass, Scheid, Toepffer, Dreizler.









